現代物理学叢書

経路積分の方法

大貫義郎・鈴木増雄・柏　太郎著

岩波書店

現代物理学叢書について

小社は先年，物理学の全体像を把握し次世代への展望を拓くことを意図し，第一級の物理学者の絶大な協力のもとに，岩波講座「現代の物理学」(全 21 巻)を 2 度にわたって刊行いたしました．幸い，多くの読者の厚いご支持をいただき，その後も数多くの巻についてさらに再刊を望む声が寄せられています．そこで，このご要望にお応えするための新しいシリーズとして，「現代物理学叢書」を刊行いたします．このシリーズには，読者のご要望に応じながら，岩波講座「現代の物理学」の各巻を順次できるかぎり収めてまいります．装丁は新たにしましたが，内容は基本的に岩波講座の第 2 次刊行のものと同一です．本シリーズによって貴重な書物群が末永く読みつがれることを願ってやみません．

●執筆分担

第1章〜第4章　大貫義郎・柏　太郎

第5章〜第7章　鈴木増雄

まえがき

周知のように，量子力学においてSchrödinger描像を採用するならば，時間の経過に伴う状態の変化はSchrödinger方程式によって記述される．そして，任意に与えられた初期条件のもとで時間に関するこの1階の微分方程式を解き，任意時間後の波動関数を求めることができるならば，散乱現象をはじめとして系のすべての性質は完全に決定されることになる．しかし，この単純な命題を解析的に厳密な閉じたかたちで遂行することは，ごく限られた場合を除いて，実際上は不可能であった．

そのためにさまざまな近似法が工夫されてきたが，扱いやすく見通しがよいかたちに理論をまず再定式化しておくことが，このような作業においてはとくに重要であった．この目的に応える手段として考案された経路積分法(path integral method)は，その代表ともみなされるべきものであり，広く用いられるに至っている．

この方法はDiracにはじまる．彼は主著『量子力学』において，Hamilton-Jacobi理論を用いて古典力学と量子力学との懸橋を議論する際に，時刻 t_a に点 q_a から出発した量子力学的波動が，微小時間 Δt の後に点 q_b に伝播するときに生ずる位相の変化を検討した．それによれば，この変化は，古典的なラグランジアンを t_a から $t_a+\Delta t$ まで積分したものをPlanck定数 $\hbar$ で割った量と

して与えられる，というものである．

一方，波動光学の **Fresnel-Huygens** の原理に見られるように，微小時間内に伝播した波面の各点は，次の微小時間に伝播する波動の源とみなすことができる．各源から発生した波は，重ね合わせの原理に従って，それぞれ加え合わされる．こうした過程がつぎつぎと繰り返され，そのつど上記の位相が生み出されて波は互いに干渉しあい，その結果，有限時間にわたっての量子力学的な波動の伝播が形成されることになる．

このようにして，時刻 t_a，点 q_a に発生した波動が時刻 t_b において点 q_b に達するときの確率振幅は，q_a から q_b に到るこれら 2 点間に形成された様々な波源を次々に結んで作られる道筋(経路)からの寄与を，すべて足しあげることにより与えられると考えられた．経路積分の名称の起りはここにある．

これを具体的に展開し最初にその応用を試みて，このようなアプローチの有効性を示したのは，**Feynman** であった．彼らの考えの根底には，ハミルトニアンを用いず，古典的なラグランジアンのみを基礎にして量子力学を定式化することが可能かも知れぬという期待があったようである．

その後，相対論的場の量子論を基盤として展開された素粒子論において，ゲージ理論の登場の際，その解析に極めて有効な手法としてしばしば採用されたのは，経路積分の方法であった．それは，ハミルトニアンと異なり，ラグランジアン密度が **Lorentz** スカラー量として扱われることが，相対論的な記述において主要な利点となったからである．

こうした経路積分を用いての物理現象へのアプローチは，理論に固有の不変性を扱う際に，古典的なラグランジアンを考えるだけでよいという手軽さも手伝って，素粒子論や物性物理をはじめとして，多くの分野に取り入れられてきた．

他方，通常の量子力学的記述を一応度外視して古典ラグランジアンだけを出発点とするこのような議論は，その簡便さのゆえにはなはだ魅力的ではあったものの，それの無制限で無批判な使用に対しては，つねに不信感ももたれてきた．実際，経路積分での力学変数は実数や複素数といった古典的な数として扱

われるが，その際，量子力学における非可換な演算子の性質はどこにいったと考えるべきだろうか．あるいは Feynman 自身指摘しているように Descartes 座標以外での経路積分法はどのようになるのであろうか．その他，例えば球面上の量子力学は，極座標で $r=1$ としたラグランジアンを用いた経路積分によって導かれ得るのか，等々といった問題が投げかけられてきたのである．

本書の前半においてわれわれは，通常の量子力学に出発点を置き，経路積分を正準量子化から導くという立場を基本にして，これらの疑問をもでき得るかぎり解いていくことを試みた．そのため，ここでは量子力学についての一応の知識は前提としたが，このような比較的基礎的な議論にある程度の重点を置いたために，素粒子関係の応用に関してはこれを割愛せざるを得なくなった．これについてはすでにいくつかの好著があり，したがって詳細はむしろそこにゆずることにする．

しかし物性物理への応用については最近の発展を本書の後半においてとり入れた．その際，経路積分の数値的評価は具体的に表示を決めて初めて実行可能となる．しかしそのための準備として，これのもつ数学的構造を研究するには，むしろ表示法を決めずに代数的に調べるほうが見通しがよい．特に，高次近似の経路積分を求めるために，その代数的一般化を詳しく説明した．これは成書としては初めての解説であり，最新の成果が盛り込まれている．

また，実際に量子系の経路積分を強い相互作用の場合に求めるための一般論である量子モンテカルロ法の基本的アイデアを解説し，その量子スピン系への応用を述べた．

このように経路積分法の応用は極めて多岐にわたっているが，これは，純粋な数学の面でも興味ある多くの問題を提起してきた．しかし数学上の厳密な定式化およびそれに伴う諸問題を論ずることは，もとより本書の目的ではない．むしろ経路積分が通常の物理学の視点から，いかなる背景のもとにどのようなかたちで扱われるかを，いろいろな角度から考察してみることを主眼としている．

経路積分法は理論物理学の最先端において現在も様々なかたちでその進展が

なされている分野である．ただ本書では，こうしたところまですべてをカバーすることはできなかった．しかしわれわれは，ここで学んだ知識をもとにすれば，そうした内容を理解することは，さほど困難ではないと信じている．

1992年6月

大貫義郎
鈴木増雄
柏　太郎

目次

1 経路積分表示

この章ではまずSchrödinger方程式から出発して経路積分表示を作りあげる．その表式中への演算子順序の反映をしらべたあと，経路積分法が真にその威力を発揮するEuclid化の方法について議論する．また，運動量と座標を基礎とする表示とは別の，コヒーレント表示にもとづく経路積分を紹介し，最後にFermi振動子の経路積分公式と，それに必要なGrassmann数について述べる．

1-1 時間推進の演算子とTrotter公式

Schrödinger方程式によって，系の時刻tでの状態$|\phi(t)\rangle$が

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = H|\phi(t)\rangle \tag{1.1}$$

と与えられたとしよう．系の時間発展はもちろんこれを解くことで得られるわけだが，一方，**時間推進の演算子**(time evolution operator) $U(t,t_0)$により，$|\phi(t)\rangle$は，

$$|\phi(t)\rangle = U(t,t_0)|\phi(t_0)\rangle \tag{1.2}$$

のように，時刻t_0の状態との関係が与えられる．(1.1)と(1.2)から$U(t,t_0)$は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0) \tag{1.3}$$

$$U(t_0,t_0) = \boldsymbol{I} \tag{1.4}$$

をみたさなければならない．$\boldsymbol{I}$ は単位演算子である．(以下では特に必要のない限り，$\boldsymbol{I}$ を 1 と書くこともある．)（1.3)を解くことは，Schrödinger 方程式(1.1)を解くことであることはいうまでもない．そのために，次のように考えてみよう．(1.3),(1.4)を無限小時間で解き，有限時間のそれは(1.2)から得られる

$$U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)U(t_1,t_0) \qquad (t_2>t_1>t_0) \tag{1.5}$$

を利用して，無限個の微小解の積み重ねで作るというものである．したがって，$t_1=t_0+\Delta t$ として

$$U(t_0+\Delta t,t_0) = 1-\frac{i}{\hbar}\Delta tH(t_1)+O((\Delta t)^2) \tag{1.6}$$

なる微小時間の解から，$t=t_N$ と書き

$$U(t_N,t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta tH(t_N)\right)\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta tH(t_{N-1})\right)\cdots\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta tH(t_1)\right) \tag{1.7}$$

が得られる．ただし，ここでハミルトニアン H は時間 t に陽によってもよいとした．また，

$$\Delta t \equiv \frac{t_N-t_0}{N} \tag{1.8}$$

ととった(図 1-1)．(1.7)にたどりつくまでに，$O((\Delta t)^2)$ の項は無視したことに注意しよう．

ハミルトニアンが時間によらないときは，指数関数の定義より

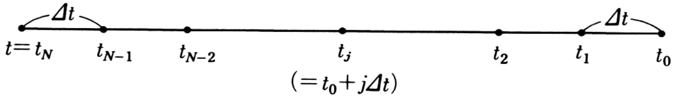


図 1-1 時間の分割．

$$U(t_N, t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta tH\right)^N = e^{-i(t-t_0)H/\hbar} \tag{1.9}$$

となる．さらに

$$H = A+B$$

のときには，(1.7)は

$$e^{-i(t-t_0)(A+B)/\hbar} = \lim_{N\to\infty}(e^{-i\Delta tA/\hbar}e^{-i\Delta tB/\hbar})^N \tag{1.10}$$

と書ける．(1.10)を **Trotter の公式**(Trotter's formula)とよぶ．(A と B は通常の場合，運動エネルギーとポテンシャルエネルギーである．) 数値的な処理を行なうときには，実際上 N は有限であり，$O((\Delta t)^2)$ 項の効果的な扱いが問題になってくる．このため，(1.10)の改良が必要であり，これは第 5 章以降で詳説する．それまでは，N は十分大きく $O((\Delta t)^2)$ は無視するという原則に従い，(1.7)を出発点として話を進める．

さて，ハミルトニアンは運動量(P)演算子と位置(Q)演算子の関数である．(われわれは Schrödinger 表示をとっている．また，簡単のため自由度は 1 としよう．) すなわち，

$$H(t) = H(P, Q; t) \tag{1.11}$$

$$[Q, P] = i\hbar, \quad [Q, Q] = [P, P] = 0 \tag{1.12}$$

で与えられている．次に，基礎ケット(ブラ)ベクトル $|p\rangle, |q\rangle$ ($\langle p|, \langle q|$) を導入する．これらは，

$$\begin{aligned} P|p\rangle &= p|p\rangle, \quad \langle p|P = \langle p|p \\ Q|q\rangle &= q|q\rangle, \quad \langle q|Q = \langle q|q \end{aligned} \tag{1.13}$$

で定義され，以下の性質をみたしている($\boldsymbol{I}$ は単位演算子)．

$$\int_{-\infty}^{\infty}|p\rangle\langle p|dp = \boldsymbol{I} \tag{1.14}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}|q\rangle\langle q|dq = \boldsymbol{I} \tag{1.15}$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q'), \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \tag{1.16}$$

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipq/\hbar}, \qquad \langle p|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipq/\hbar} \tag{1.17}$$

(1.13)から(1.17)までの関係を用いることで，(1.10)あるいは(1.7)はc数表示され，経路積分公式が次のように与えられる．(1.7)に(1.15)をくり返し用いて

$$U(t_N, t_0) = \lim_{N\to\infty} |q_N\rangle \prod_{j=1}^{N} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \langle q_j| 1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H_j(P, Q) |q_{j-1}\rangle \right\} \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \langle q_0| \tag{1.18}$$

が得られる．ここで，

$$H(P, Q; t_j) \equiv H_j(P, Q) \tag{1.19}$$

と書いた．(1.18)の要素である，微小時間の **Feynman 核**

$$K(q_j, t_j; q_{j-1}, t_{j-1}) \equiv \langle q_j| 1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H_j(P, Q) |q_{j-1}\rangle \tag{1.20}$$

は，

$$H(P, Q; t) = \sum_{m,n} a_{mn}(t) P^m Q^n \tag{1.21}$$

であるならば，(1.14)を $(1 - i\Delta t H_j(P, Q)/\hbar)$ の左側に挿入し，(1.13)と(1.17)に留意すると，

$$K(q_j, t_j; q_{j-1}, t_{j-1})^{(PQ)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H_j(p_j, q_{j-1})\right) \tag{1.22}$$

となる．あるいは

$$H(P, Q; t) = \sum_{m,n} b_{mn}(t) Q^m P^n \tag{1.23}$$

であったなら，(1.14)を右側に挿入し，ふたたび(1.13)，(1.17)を用いれば，

$$K(q_j, t_j; q_{j-1}, t_{j-1})^{(QP)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H_j(p_j, q_j)\right) \tag{1.24}$$

と書ける．これからわかるように，まず与えられたハミルトニアンを，(1.21)あるいは(1.23)のかたちに，交換関係を用いて変形しなければならないが，こ

うした過程のことを**演算子順序**(operator ordering)**の問題**といい，(1.21)，(1.23)の場合をそれぞれ ***PQ*-順序付け**，***QP*-順序付け**(ordering)とよぶ．この反映は，ハミルトニアンの q の足のラベルが q_{j-1}, q_j のように異なったものになることに注意して，以下すこし詳しく論じよう．

1-2 演算子順序と Weyl の順序付け

ハミルトニアン(1.11)に，(1.14),(1.15)をそれぞれ2回用いて

$$H(P,Q;t) = \iiiint |q_1\rangle\langle p_1|H(P,Q;t)|p_2\rangle\langle q_2|e^{i(p_1q_1-p_2q_2)/\hbar}\frac{dp_1}{2\pi\hbar}dp_2dq_1dq_2 \tag{1.25}$$

が得られる．ここで(1.17)を用いた．変数変換

$$\begin{aligned} p_1 &= p+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)u, \qquad q_1 = q+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)v \\ p_2 &= p-\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)u, \qquad q_2 = q-\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)v \end{aligned} \tag{1.26}$$

を行なうと，

$$H(P,Q;t) = \iiint \left|q+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)v\right\rangle\left\langle q-\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)v\right|H^{[\alpha]}(p,q;t)e^{ipv/\hbar}dvdq\frac{dp}{2\pi\hbar} \tag{1.27}$$

$$H^{[\alpha]}(p,q;t) \equiv \int\left\langle p+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)u\right|H(P,Q;t)\left|p-\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)u\right\rangle e^{iqu/\hbar}du \tag{1.28}$$

が求まる．α はパラメータである．その役割をみるため，$H(P,Q;t)$ として，

$$\begin{aligned} H(P,Q) \equiv e^{i(aP+bQ)/\hbar} &= e^{iaP/\hbar}e^{ibQ/\hbar}e^{-iab/2\hbar} \\ &= e^{ibQ/\hbar}e^{iaP/\hbar}e^{+iab/2\hbar} \end{aligned} \tag{1.29}$$

(a, b は c 数)を考えてみよう．ここで Campbell-Baker-Hausdorff の公式

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \tag{1.30}$$

(ただし $[A,[A,B]]=[B,[A,B]]=0$)，および

$$e^{ibQ/\hbar}\left|p-\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)u\right\rangle = \left|p+b-\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)u\right\rangle$$

や(1.16)などに注意して，すこし計算すると

$$H^{[\alpha]}(p,q) = e^{i(ap+bq)/\hbar - i\alpha ab/\hbar} \tag{1.31}$$

が得られる．(1.29)と(1.31)をくらべて

$\alpha=1/2$ で

$$e^{iaP/\hbar}e^{ibQ/\hbar} \rightarrow e^{iap/\hbar}e^{ibq/\hbar} \tag{1.32}$$

$\alpha=-1/2$ で

$$e^{ibQ/\hbar}e^{iaP/\hbar} \rightarrow e^{ibq/\hbar}e^{iap/\hbar} \tag{1.33}$$

$\alpha=0$ で

$$e^{i(aP+bQ)/\hbar} \rightarrow e^{i(ap+bq)/\hbar} \tag{1.34}$$

の対応関係が得られる．(1.32)から(1.34)において，矢印の両辺で a, b の適当なべきをとって比較することから，$\alpha=1/2$ は

$$P^mQ^n \rightarrow p^mq^n \tag{1.35}$$

という ***PQ*-順序**，$\alpha=-1/2$ は

$$Q^nP^m \rightarrow q^np^m \tag{1.36}$$

という ***QP*-順序**，$\alpha=0$ は **Weyl 順序**

$$\frac{1}{2}(PQ+QP) \rightarrow pq$$

$$\frac{1}{3}(P^2Q+PQP+QP^2) \rightarrow p^2q \tag{1.37}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

とそれぞれよばれる．こうしたパラメータ α で指定される順序付けを，**α-順序**とよぼう．

さて，(1.27)を(1.20)に用いたときの表示を求めよう．まず(1.27)の行列要素が

$$\langle q_j|H(P,Q;t_j)|q_{j-1}\rangle = \int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}e^{ip_j(q_j-q_{j-1})/\hbar}H_j^{[\alpha]}(p_j, q_j^{(\alpha)}) \tag{1.38}$$

と与えられることに注意しよう．ここで

$$q_j^{(\alpha)} \equiv \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)q_j+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)q_{j-1} \tag{1.39}$$

であり，(1.16)の左側の関係を使った．これより，(1.20)は

$$\begin{aligned} K(q_j, t_j; q_{j-1}, t_{j-1}) &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j-q_{j-1})/\hbar}\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta t H_j^{[\alpha]}(p_j, q_j^{(\alpha)})\right) \\ &\cong \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{i\{p_j(q_j-q_{j-1})-\Delta t H_j^{[\alpha]}(p_j, q_j^{(\alpha)})\}/\hbar} \end{aligned} \tag{1.40}$$

となる．(1.40)の第2式では，ふたたび $O((\Delta t)^2)$ 項を無視する原則を用いた*.

(1.40)を(1.18)に代入すると，時間推進の演算子の経路積分表示

$$\begin{aligned} U(t_N, t_0) = \lim_{N\to\infty} |q_N\rangle \prod_{j=1}^{N} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} dq_j \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\{p_j(q_j-q_{j-1}) \\ -\Delta t H_j^{[\alpha]}(p_j, q_j^{(\alpha)})\}\Big]\int dq_0 \langle q_0| \end{aligned} \tag{1.41}$$

にたどりつく．演算子順序の経路積分表示への反映は，(1.28)で与えられるc数ハミルトニアンの関数形と，その q_j と q_{j-1} のまじり方にあらわれる．

$\alpha=-1/2$ の QP-順序のときは，

$$H_j^{[-1/2]}(p_j, q_j) \tag{1.42}$$

$\alpha=0$ の Weyl 順序では

$$H_j^{[0]}(p_j, \bar{q}_j) \qquad \left(\bar{q}_j \equiv \frac{q_j+q_{j-1}}{2}\right) \tag{1.43}$$

$\alpha=1/2$ の PQ-順序では

---

* しかし，このことには疑問をはさむ向きがあるかもしれない．というのは，p_j, q_j は被積分量であって，$H_j^{[\alpha]}$ はこれらの大きいところでは十分大きく，Δt がいくら小さくともこの保障は完全でないと思われるからである．1つの考え方としては，(1.40)の積分のところに $\exp(-\kappa p_j^2)$ や $\exp(-\lambda q_j^2)$ という因子をかけておいて，p, q の大きいところをきかなくしておいて，計算の最後で $\kappa, \lambda\to 0$ ととるというものである．実際やってみると，これらはスムーズに0にできて $O((\Delta t)^2)$ 無視の原則はよさそうにみえる．物理的には，時間推進の演算子は(1.2)のように，常に波動関数を伴い，波動関数は波束であるので，運動量，座標についてそれぞれ中心値からはなれていくと，急速にゼロになっていく．このため，実質的に積分(1.14)，(1.15)の (p, q) の大きいところは，カットされていると思うこともできる．

$$H_j^{[1/2]}(p_j, q_{j-1}) \tag{1.44}$$

のようになる．(1.43)の $\bar{q}_j$ から，Weyl 順序付けのことを，**中点処方**(mid-point prescription)とよぶこともある．(1.25)から(1.28)までの過程からおよそ想像のつくことであるが，結果は，パラメータ α によらない．

さて，(1.20)の記法に従うと，有限時間の Feynman 核は，

$$\begin{aligned} K(q_\mathrm{f}, t_N; q_\mathrm{i}, t_0) &\equiv \langle q_\mathrm{f} | U(t_N, t_0) | q_\mathrm{i} \rangle \\ &= \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \prod_{j=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \{p_j \Delta q_j - \Delta t H_j^{[\alpha]}(p_j, q_j^{(\alpha)})\}\right] \end{aligned} \tag{1.45}$$

ただし，$q_0 = q_\mathrm{i}$, $q_N = q_\mathrm{f}$

$$\Delta q_j \equiv q_j - q_{j-1} \tag{1.46}$$

と与えられる．ハミルトニアンが

$$H(P, Q) = \frac{P^2}{2m} + V(Q) \tag{1.47}$$

で与えられるならば，(1.28)から

$$H^{[\alpha]}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{1.48}$$

となり(α によらない)，これを(1.45)に代入し，公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-iap^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{ia}} \tag{1.49}$$

を用いると，

$$\begin{aligned} K(q_\mathrm{f}, t_N; q_\mathrm{i}, t_0) = \lim_{N\to\infty} &\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\, dq_j \\ &\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{j=1}^{N} \left\{\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta q_j}{\Delta t}\right)^2 - V(q_j^{(\alpha)})\right\}\right]_{q_N = q_\mathrm{f},\, q_0 = q_\mathrm{i}} \end{aligned} \tag{1.50}$$

という，Feynman の導いた経路積分公式にたどりつく*．(1.45)を**位相空間**

---

* $q_j^{(\alpha)}$ は q_j としてよい．演算子順序の問題はいまの場合ないからである．

経路積分公式(phase space path integral formula), (1.50)を**Feynman 経路積分公式**とよぶ．ハミルトニアンが運動量Pの2次式のとき，すなわち(1.47)の場合にかぎり，Feynman 公式が得られることに注意しよう．この意味で，位相空間公式はより一般的である．(1.50)で$V(q)=0$のときは，q-積分を((1.49)で$i\to -i$として)遂行できて，

$$K_0(q_\mathrm{f}, t_N; q_\mathrm{i}, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_N-t_0)}}\exp\left[\frac{im(q_\mathrm{f}-q_\mathrm{i})^2}{2\hbar(t_N-t_0)}\right] \tag{1.51}$$

となる．

(1.45), (1.50)で$N\to\infty$を形式的にとると，

$$\begin{aligned}(1.45) &\Longrightarrow \iint DqDp\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}d\tau\{p\dot{q}-H^{[\alpha]}(p,q;\tau)\}\right]\\ (1.50) &\Longrightarrow \int Dq\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}d\tau\left\{\frac{m}{2}\dot{q}^2-V(q)\right\}\right]\end{aligned} \tag{1.52}$$

のように書ける．Dq, Dpの定義も独立になされるべきであるが，それは第2章の摂動論のところで議論する．(1.52)の表示を**連続表示**とよび，後述する摂動論やWKB近似では役に立つ．(1.52)の下側の式で，指数の肩はラグランジアン

$$L(q,\dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)$$

であり，この意味で(1.45), (1.50)をそれぞれ，**ハミルトニアン経路積分公式**，および**ラグランジアン経路積分公式**とよぶこともある．

さて(1.45)を用いれば，(1.2)式は

$$\psi(q, t_N) = \int dq'\, K(q, t_N; q', t_0)\psi(q', t_0) \tag{1.53}$$

となる．ただし

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle \tag{1.54}$$

と書ける．こうしてある時刻t_0での波動関数$\psi(q, t_0)$がわかれば，経路積分表示で与えられたFeynman 核を通して時刻tでの波動関数が求まることにな

るが，経路積分表示(1.45)や(1.50)はそれ自体，単に時間推進の演算子の1つの表現である．もちろんこうした表現の下，通常の量子力学とは異なる扱い，たとえば，後で述べるWKB近似などが楽にできるという利点はあるものの，依然として波動関数を求めるには，従来のようにSchrödinger方程式を解かなければならない．しかし，以下で議論するEuclid化の方法を経ることで，経路積分がそれ自身としての意味をもつことになる．

1-3 Euclid化の方法とトレース公式

まずハミルトニアンが

$$\begin{aligned} H^{\boldsymbol{J}}(t) &\equiv H(P,Q)+\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}(t) \\ &(= H(P,Q)+PK(t)+QJ(t)) \end{aligned} \tag{1.55}$$

で与えられるとしよう．ここで，表記の簡単さのため，ベクトル表記

$$\boldsymbol{\varphi} \equiv (P,Q), \qquad \boldsymbol{J}(t) \equiv (K(t),J(t)) \tag{1.56}$$

を導入した．$K(t)$, $J(t)$ はc数外場である．(1.55)のハミルトニアンで与えられる時間推進の演算子(1.7)を，ハミルトニアン $H(P,Q)$ の基底状態 $|0\rangle$,

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle \tag{1.57}$$

ではさんだ

$$Z(\boldsymbol{J};t_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{i}}) \equiv \langle 0|U^{\boldsymbol{J}}(t_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{i}})|0\rangle \tag{1.58}$$

を定義しよう．ここで(1.7)の t_N を t_{f}, t_0 を t_{i} とし，外場 $\boldsymbol{J}$ の依存性を $U^{\boldsymbol{J}}$ と表わした．Z の物理的意味を理解するため，$\boldsymbol{J}(t)$ で微分して $\boldsymbol{J}=0$ とおいてみる．たとえば，2回微分すれば

$$-\hbar^2 Z^{-1}\left.\frac{\partial^2 Z}{\partial\boldsymbol{J}(t_1)\partial\boldsymbol{J}(t_2)}\right|_{\boldsymbol{J}=0} = \langle 0|T\boldsymbol{\varphi}(t_1)\boldsymbol{\varphi}(t_2)|0\rangle \tag{1.59}$$

となる．ただし，ここで T-積(時間積)

$$TA(t_1)B(t_2) = \theta(t_1-t_2)A(t_1)B(t_2)+\theta(t_2-t_1)B(t_2)A(t_1) \tag{1.60}$$

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & (t>0) \\ 0 & (t<0) \end{cases}$$

および Heisenberg 表示

$$\boldsymbol{\varphi}(t) = e^{+itH/\hbar}\boldsymbol{\varphi}e^{-itH/\hbar} \tag{1.61}$$

を，((1.9)を用いた後に)導入した．(1.59)の右辺は(2 点の) **Green 関数**とよばれる．n 回微分して $\boldsymbol{J}=0$ とおけば，n 点 Green 関数が求まる．この意味で，Z を Green 関数の**母関数**(generating function)という．母関数が求まることは，問題が解けたこと，すなわち，すべてのエネルギーレベル E_n,

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn} \qquad (m, n=0,1,2,\cdots) \tag{1.62}$$

および $|n\rangle$ によるあらゆる物理量の期待値

$$\langle n|F(\boldsymbol{\varphi})|n\rangle$$

($F(\boldsymbol{\varphi})$ は P, Q の任意関数)が求まることと同等である*.

こうした準備の下，Euclid 化の方法について話を進めよう．(1.7)の時間推進の演算子の時間を $t\to -it$ とした，虚時間推進の演算子

$$\tilde{U}^{\boldsymbol{J}}(t_\mathrm{f}, t_\mathrm{i}) \equiv \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_N{}^{\boldsymbol{J}}(P,Q)\right)\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_{N-1}{}^{\boldsymbol{J}}(P,Q)\right)\cdots\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_1{}^{\boldsymbol{J}}(P,Q)\right) \tag{1.63}$$

を考える．ここに

$$\Delta t \equiv \frac{t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i}}{N} \equiv \frac{T}{N} \tag{1.64}$$

$$H_j{}^{\boldsymbol{J}}(P,Q) \equiv H(P,Q)+\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}_j \tag{1.65}$$

で，外場 $\boldsymbol{J}$ は解析接続可能であるとし，$\boldsymbol{J}(-it_j)\equiv\boldsymbol{J}_j$ と書き，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}(t) &\neq 0 \qquad (|T_1|\geqq|t|\geqq|T_0|) \\ \boldsymbol{J}(t) &= 0 \qquad (|t|>|T_1|,\ |t|<|T_0|) \end{aligned} \tag{1.66}$$

をみたすとする(図 1-2)．以下の関係に注意しよう．

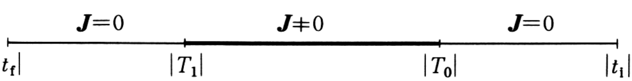


図 1-2 外場は $|T_1|\geqq|t|\geqq|T_0|$ でだけ存在する．

* くわしい説明は省くが，n 点 Green 関数の各時間 t_i に関する Fourier 変換を行ない，その極を調べることからエネルギーレベルが，その留数から物理量の期待値が求まる．

$$\tilde{U}^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i}) \underset{-it\leftarrow t}{\overset{t\to it}{\rightleftarrows}} U^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i}) \tag{1.67}$$

また

$$\tilde{U}^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i}) = e^{-(t_{\rm f}-T_1)H/\hbar}\,\tilde{U}^{J}(T_1, T_0)e^{-(T_0-t_{\rm i})H/\hbar} \tag{1.68}$$

(1.68)では，(1.66)を考慮し，(1.9)を用いた．さて

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) &\equiv \mathrm{Tr}\,\tilde{U}^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i})\\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\tilde{U}^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i})|n\rangle \end{aligned}\tag{1.69}$$

を定義する．$|n\rangle$ は(1.62)で導入したハミルトニアン $H(P,Q)$ の固有状態，**Tr** はトレースとよばれる．(1.69)は他の表示をとってもよい．実際(1.69)の右辺は，$|q\rangle$ 表示では

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q|\tilde{U}^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i})|q\rangle \tag{1.70}$$

で与えられる．これを**トレース公式**とよぶ．

いま，(1.69)で $T(\equiv t_{\rm f}-t_{\rm i})\to\infty$ とし，(1.68)を用いると，

$$\begin{aligned}\lim_{T\to\infty}\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) &= \lim_{T\to\infty}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-TE_n/\hbar}\,e^{(T_1-T_0)E_n/\hbar}\langle n|\tilde{U}^{J}(T_1, T_0)|n\rangle\\ &= \lim_{T\to\infty} e^{-TE_0/\hbar}\,e^{(T_1-T_0)E_0/\hbar}\langle 0|\tilde{U}^{J}(T_1, T_0)|0\rangle\end{aligned}\tag{1.71}$$

となる．指数減衰のために基底状態だけが取り出されることに注意しよう．虚時間を導入しなかったら，こううまくはいかなかった．$T\to\infty$ とした(1.71)の最後で(1.67)の関係を用いれば，母関数 $Z(\boldsymbol{J};T_1,T_0)$ が求まることになる．相対論で用いられる言葉を流用して，通常の t の表示を **Minkowski 表示**，虚時間表示を **Euclid 表示**という．(Minkowski 空間の距離 $(ct)^2-\boldsymbol{x}^2$ が $t\to -it$ で，Euclid 空間の距離 $-\{(ct)^2+\boldsymbol{x}^2\}$ になる.)

この方法のありがたさは，母関数(1.58)の経路積分表示と，(1.70)のそれとを比較してみるとよくわかる．前者は

$$K^{J}(q_{\rm f}, t_{\rm f}; q_{\rm i}, t_{\rm i}) \equiv \langle q_{\rm f}|U^{J}(t_{\rm f}, t_{\rm i})|q_{\rm i}\rangle \tag{1.72}$$

として，(1.45)のように表わされた$K^{\boldsymbol{J}}$を用いて

$$Z(\boldsymbol{J};t_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{i}}) = \int dq_{\mathrm{f}}dq_{\mathrm{i}}\psi_0{}^*(q_{\mathrm{f}})K^{\boldsymbol{J}}(q_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{f}};q_{\mathrm{i}},t_{\mathrm{i}})\psi_0(q_{\mathrm{i}})$$

と書ける．ただし，

$$\psi_0(q) \equiv \langle q|0\rangle$$

は基底状態の波動関数で，これを知るにはSchrödinger 方程式を解かなければならない．一方，後者は，(1.70)から出発して，前節の(1.45)の表式にたどりつく過程をもう一度たどることにより，

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\iint_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_jdq_j}{2\pi\hbar}\right)\exp\left[\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{ip_j\Delta q_j - \Delta t(H^{[\alpha]}(p_j,q_j{}^{(\alpha)}) + p_jK_j + q_jJ_j)\}\right]\Bigg|_{\text{periodic}} \qquad (1.73)^*$$

と求まる．ここで，“periodic”は

$$q_N = q_0 \qquad (1.74)$$

なる**周期境界条件**(periodic boundary condition)を表わしている．(もちろんこれは，トレース公式(1.70)の反映である．)(1.73)では，前者のようにSchrödinger 方程式を解かねば得られないような要素は何もない．ただ，周期境界条件(1.74)だけを考慮して経路積分を行なえばよい．最後に，得られた結果において，$T\to\infty$ として，(1.67)の関係に留意しつつ $t\to it$ と Minkowski 時間にもどしてやることにより，母関数が求まる．Euclid 化の方法を採用したことによって，経路積分公式(1.73)は，独自の地位を築いたといってよい．

同様の議論は，トレース公式(1.70)の代わりに，外場$\boldsymbol{J}$を含んだ虚時間での Feynman 核

$$\tilde{K}^{\boldsymbol{J}}(q_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{f}};q_{\mathrm{i}},t_{\mathrm{i}}) = \langle q_{\mathrm{f}}|\tilde{U}^{\boldsymbol{J}}(t_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{i}})|q_{\mathrm{i}}\rangle$$
$$\left(\overset{T\to\infty}{=} e^{-TE_0/\hbar}e^{(T_1-T_0)E_0/\hbar}\langle q_{\mathrm{f}}|0\rangle\langle 0|q_{\mathrm{i}}\rangle\langle 0|\tilde{U}^{\boldsymbol{J}}(T_1,T_0)|0\rangle\right)$$

---

* 外場J_jと結合しているq_jの足は，$q_j{}^{(\alpha)}J_j$としてもよいが，この項にはそもそも演算子順序の問題はないので，表記の簡単さのため，q_jJ_jとした．

$$= \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j \prod_{j=1}^{N} \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{p_j \Delta q_j + i\Delta t\{H^{[\alpha]}(p_j, q_j{}^{(\alpha)})\right.\right.$$
$$\left.\left.+ p_j K_j + q_j J_j\}\right\}\right]\Bigg|_{q_N=q_{\rm f},\, q_0=q_{\rm i}} \tag{1.75}$$

から出発してもできる．もし，ハミルトニアンが(1.47)で与えられるならば，(1.49)の代わりにGauss 積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-ap^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}$$

を用いることで，(1.73)および $\tilde{K}^{J}$ における(Euclid)**Feynman 経路積分公式**

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}}\, dq_j \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2\Delta t}(\Delta q_j + i\Delta t K_j)^2\right.\right.$$
$$\left.\left.+ \Delta t(V(q_j{}^{(\alpha)}) + q_j J_j)\right\}\right]\Bigg|_{\rm periodic} \tag{1.76}$$

$$\tilde{K}^{J}(q_{\rm f}, t_{\rm f}; q_{\rm i}, t_{\rm i}) = \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}}\, dq_j \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2\Delta t}\right.\right.$$
$$\left.\left.\times(\Delta q_j + i\Delta t K_j)^2 + \Delta t(V(q_j{}^{(\alpha)}) + q_j J_j)\right\}\right]\Bigg|_{q_N=q_{\rm f},\, q_0=q_{\rm i}} \tag{1.77}$$

が得られる．容易にわかるように，

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \int dq \tilde{K}^{J}(q, t_{\rm f}; q, t_{\rm i}) \tag{1.78}$$

である．外場 $\boldsymbol{J}=0$ のとき，これは

$$\tilde{Z}_T(0) = {\rm Tr}\, e^{-TH/\hbar}$$

と書け，統計力学で**分配関数**(partition function)(このとき $T/\hbar \to 1/k_{\rm B}$'T'$\equiv \beta$ で $k_{\rm B}$ は Boltzmann 定数，'T' は温度)とよばれる量である．$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J})$ は**温度 Green 関数**の母関数といわれる．こうした観点からすると，量子力学と統計力学には構造的な類似性が存在し，この類似性に準拠して議論を進めて行くことは，自由度無限大の場の理論の場合に，きわめて有効な手段となっている．

まとめれば，Euclid 表示の下，周期境界条件(1.74)あるいは，(1.75)の q_N

$=q_{\rm f}, q_0=q_{\rm i}$ という簡単な境界条件で経路積分を計算して，最後に $T\to\infty$ をとれば，必要な情報はすべて得られるということである．

1-4 コヒーレント表示と経路積分公式

前節までの議論は (p,q) 変数に限ってきたが，量子力学では粒子数表示 $(a,a^\dagger)$ もよく用いられる．それは，

$$
\begin{aligned}
Q &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger), \qquad P = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a-a^\dagger) \\
a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(Q+i\frac{P}{m\omega}\right), \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(Q-i\frac{P}{m\omega}\right)
\end{aligned}
\tag{1.79}
$$

で与えられる．ここで m は質量，ω は角振動数である．交換関係(1.12)は，

$$
[a,a^\dagger]=1, \qquad [a,a]=[a^\dagger,a^\dagger]=0 \tag{1.80}
$$

となる．調和振動子((2.1)式)のときは，(1.79)がハミルトニアンを対角化することはよく知られており，そこでの経験から，$a^\dagger$ を**生成演算子**(creation operator)，a を**消滅演算子**(anihilation operator)とよぼう．

経路積分表示を (p,q) の場合と同様に求めるには，関係式(1.13)～(1.15)，特に(1.14)および(1.15)の完全性の条件に相当する，単位元の分解の関係式が必要である．そこでいまの場合，

$$
a|z\rangle = z|z\rangle \tag{1.81}
$$

なる a の固有状態 $|z\rangle$ をさがそう．a は Hermite 演算子でないから，z は複素数である．真空を

$$
a|0\rangle = 0 \tag{1.82}
$$

で定義すると，

$$
|z\rangle = e^{a^\dagger z-z^*a}|0\rangle = e^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{1.83}
$$

であることは，

$$
e^{-(a^\dagger z-z^*a)}a\,e^{a^\dagger z-z^*a} = a+z \tag{1.84}
$$

に注意すればすぐわかる．(1.83)の最後の式への変形には，(1.30)を使って a を右によせ，$e^{z^* a}|0\rangle = |0\rangle$ と

$$|n\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \tag{1.85}$$

を用いた．ここで $|n\rangle$ は完全性の条件

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = I \tag{1.86}$$

をみたす．(1.83)の共役状態は

$$\langle z| = e^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(z^*)^n}{\sqrt{n!}}\langle n| \tag{1.87}$$

であり，公式

$$\iint d^2z e^{-|z|^2} z^m z^{*n} = \pi m!\delta_{mn} \tag{1.88}$$

(この公式の証明は，$z = re^{i\theta}$ とおいて積分を

$$\iint d^2z \equiv \int_0^\infty rdr\int_0^{2\pi} d\theta$$

とすれば簡単である)と(1.86)に留意すれば

$$\iint \frac{d^2z}{\pi}|z\rangle\langle z| = \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| = I \tag{1.89}$$

という，**単位の分解**(resolution of unity)が出る．内積は，

$$\langle z'|z\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}\{z'^*(z'-z)-(z'^*-z^*)z\}\right] \tag{1.90}$$

となって，$z' \neq z$ のとき直交性をみたさない．つまり，(1.89)の右側から $|z'\rangle$ をかけて

$$\iint \frac{d^2z}{\pi}|z\rangle\langle z|z'\rangle = |z'\rangle$$

とし，右辺を，形式的に δ 関数を入れて

$$|z'\rangle = \iint \frac{d^2z}{\pi}\delta^2(z-z')|z\rangle$$

と書いて左辺に移項すると

$$\iint \frac{d^2z}{\pi}|z\rangle\{\langle z|z'\rangle - \delta^2(z-z')\} = 0$$

となる．$|z\rangle$が1次独立であるためには，{　}がゼロでなければならないが，(1.90)より{　}はゼロでない．よって$|z\rangle$は1次従属であり，この意味で，**過剰完全系**(overcomplete set)とよばれる．物理的には，$|z\rangle$は不確定性関係を最小にする状態であることから，**コヒーレント状態**とよばれる．

ハミルトニアン

$$H^{\eta} \equiv H(a^{\dagger}, a) + a^{\dagger}\eta(t) + \eta^*(t)a \tag{1.91}$$

($\eta(t), \eta^*(t)$は外場で，(1.66)に従っているとする)で与えられる時間推進の演算子

$$\tilde{U}^{\eta}(t_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{i}}) = \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_N{}^{\eta}\right)\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_{N-1}{}^{\eta}\right)\cdots\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_1{}^{\eta}\right)$$

をトレース公式

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{\eta}) = \iint \frac{d^2z}{\pi}\langle z|\tilde{U}^{\eta}(t_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{i}})|z\rangle \tag{1.92}$$

に入れ，(1.89)を順次用いていくと，

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_T(\boldsymbol{\eta}) &= \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\iint\frac{d^2z_j}{\pi}\exp\left[\sum_{j=1}^{N}\left\{-\frac{1}{2}z_j{}^*\Delta z_j + \frac{1}{2}\Delta z_j{}^* z_{j-1}\right.\right.\\ &\qquad \left.\left.\left.-\frac{\Delta t}{\hbar}(H(z_j{}^*, z_{j-1}) + z_j{}^*\eta_j + \eta_j{}^* z_{j-1})\right\}\right]\right|_{\text{periodic}}\\ &= \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\iint\frac{d^2z_j}{\pi}\exp\left[\sum_{j=1}^{N}\left\{-z_j{}^*\Delta z_j - \frac{\Delta t}{\hbar}(H(z_j{}^*, z_{j-1}) + z_j{}^*\eta_j\right.\right.\\ &\qquad \left.\left.\left.+\eta_j{}^* z_{j-1})\right\}\right]\right|_{\text{periodic}}\end{aligned} \tag{1.93}$$

となる．ここで，"periodic"は

$$z_0 = z_N \qquad (z_0{}^* = z_N{}^*) \tag{1.94}$$

であり，(1.46)の記法

$$\Delta z_j \equiv z_j - z_{j-1}$$

を導入し，最後の式へは“部分積分”

$$\sum_{j=1}^{N} \Delta z_j{}^* z_{j-1} = -\sum_{j=1}^{N} z_j{}^* \Delta z_j \tag{1.95}$$

を用いた(周期条件(1.94)のため可能であった)．(1.93)でハミルトニアンの $z_j{}^*$ と z_{j-1} の足が異なるのは，行列要素

$$\langle z_j | H(a^\dagger, a) | z_{j-1} \rangle$$

で

$$\langle z_j | a^\dagger = \langle z_j | z_j{}^* \tag{1.96}$$

と左で c 数化し，a は(1.81)で

$$a | z_{j-1} \rangle = z_{j-1} | z_{j-1} \rangle$$

のように右側で c 数化するからである．(1.93)が求める経路積分表示である．

1-5 Fermi 振動子の経路積分表示

前節で，$(a, a^\dagger)$ 系の経路積分をコヒーレント状態を用いて議論したが，これらの議論は Bose 系の関係式(1.80)に対応して，反交換関係

$$\{A, B\} \equiv AB + BA \tag{1.97}$$

の導入により Fermi 系へと拡張することができる．

$$\{a, a^\dagger\} = 1, \qquad \{a, a\} = \{a^\dagger, a^\dagger\} = 0 \tag{1.98}$$

(1.98)の最後の式は，べき零

$$a^2 = (a^\dagger)^2 = 0 \tag{1.99}$$

を意味する．Bose 系同様，$a^\dagger$ (a) を生成(消滅)演算子とよび，コヒーレント状態

$$a | \xi \rangle = \xi | \xi \rangle \tag{1.100}$$

を作ろう．しかし Bose 系と異なり，(1.100)をみたすには複素数ではだめで，

Grassmann 数(G 数)という概念が必要になる．それは，

$$\{\xi, \xi^*\} = 0, \qquad \xi^2 = (\xi^*)^2 = 0 \tag{1.101}$$

で定義される，大きさのない量である*．べき零のため，有限個の G 数からなる任意の関数の Taylor 展開は必ず有限項で止まる．たとえば，

$$f(\xi^*, \xi) = f_0 + f_1\xi + f_2\xi^* + f_3\xi^*\xi \tag{1.102}$$

である．次に積分を定義する．

$$\begin{aligned} &\int \xi d\xi = i, \qquad \int \xi^* d\xi^* = i \qquad (i \equiv \sqrt{-1}) \\ &\int d\xi = 0, \qquad \int d\xi^* = 0 \end{aligned} \tag{1.103}$$

ここで，積分測度 $d\xi, d\xi^*$ を導入したが，その性質は

$$\{d\xi, \xi\} = \{d\xi, \xi^*\} = \{d\xi, d\xi^*\} = \cdots = 0 \tag{1.104}$$

であるとしておく．つまり，$d\xi$ も $d\xi^*$ も，すべての量と反可換であるとする**．言葉を 2 つ導入しよう．反交換関係に従う量は，互いに **Grassmann 奇要素**(**G-奇**)，すべての量と交換関係に従う量は，**Grassmann 偶要素**(**G-偶**)とよぶ．いいかえると，G-奇同士は入れ換えると符号が変わり，G-偶は入れ換えに際して符号を変えない．

自由度が n 個のときの積分公式は，

$$\begin{aligned} &\int \xi_1\xi_2\cdots\xi_{n-1}\xi_n d\xi_n d\xi_{n-1}\cdots d\xi_2 d\xi_1 = i^n \\ &\int \xi_{i_1}\cdots\xi_{i_j} d\xi_n d\xi_{n-1}\cdots d\xi_1 = 0 \qquad (0 \leqq j < n) \end{aligned} \tag{1.105}$$

で定義される．もちろん，

$$\{\xi_i, \xi_j\} = 0, \qquad \{d\xi_i, \xi_j\} = 0, \qquad \{d\xi_i, d\xi_j\} = 0$$

---

* 大きさがないから，複素共役という概念もない．したがって ξ と ξ^* は複素共役ではなく，2 つの独立な G 数である．後述するように，それぞれ a ($a^\dagger$) の固有値に相当するものであり，この意味で互いに共役(adjoint)の関係にあるといってもよい．

** $d\xi$ も $d\xi^*$ も，G-奇であると仮定したわけであるが，G-偶にしてもよい．そのときは，(1.103)の右辺の i は 1 にする．i があらわれた理由は，$d\xi$ として G-奇の定義を採用し，以下で述べる共役演算に対する不変性を要請したからである．

である．いま，(1.105)において変数変換*

$$\xi_i{}' = \sum_{j=1}^{n} M_{ij}\xi_j + \zeta_i \tag{1.106}$$

を考えよう．$\xi_i{}', \zeta_i$ は新しいG数である．$(\xi_i{}')^2=(\xi_i)^2=(\zeta_i)^2=0$ を考慮すると，

$$\xi_1{}'\xi_2{}'\cdots\xi_{n-1}{}'\xi_n{}' = \det M_{ij}(\xi_1\xi_2\cdots\xi_{n-1}\xi_n)+O(\zeta) \tag{1.107}$$

が容易に得られる．($O(\zeta)$ は，ζ を含む項であり，すなわち ξ_i については，n 次以下の項である.) $\xi_i{}'$ は独立であるとするならば，

$$\int \xi_1{}'\xi_2{}'\cdots\xi_{n-1}{}'\xi_n{}'d\xi_n{}'d\xi_{n-1}{}'\cdots d\xi_2{}'d\xi_1{}' = i^n$$

は成立しているはずであるから，(1.107)を考慮すれば，変換のヤコビアンが

$$d^n\xi' = (\det M_{ij})^{-1}d^n\xi \tag{1.108}$$

と求まる．ただし，ここで

$$d^n\xi \equiv d\xi_n d\xi_{n-1}\cdots d\xi_1 \tag{1.109}$$

である．δ 関数は，

$$\delta(\xi_i-\xi_j) \equiv \frac{1}{i}(\xi_i-\xi_j) \tag{1.110}$$

で定義され，その Fourier 変換

$$\int e^{\xi^*(\xi_i-\xi_j)}d\xi^* = \delta(\xi_i-\xi_j) \tag{1.111}$$

および

$$\int f(\xi_i)\delta(\xi_i-\xi_j)d\xi_i = f(\xi_j)$$

などは容易に導かれる．Gauss 積分の公式に対応する公式

---

* 簡単のため，M_{ij} は通常の数からなる行列とするが，一般には，G数を含むG-偶要素であるとしてよい．こうした議論は，Y. Ohnuki and T. Kashiwa: Prog. Theor. Phys. **60**(1978) 548 を参照するか，より一般的に拡張された数の積分，変数変換を扱った Y. Ohnuki and S. Kamefuchi: *Quantum Field Theory and Parastatistic*(University of Tokyo Press, 1982) の Chapter 27 および Appendix H をみればよい．

$$\int e^{-\xi_i{}^* M_{ij}\xi_j} d^n\xi d^n\xi^* = \det M_{ij} \tag{1.112}$$

$$d^n\xi^* \equiv d\xi_1{}^* d\xi_2{}^* \cdots d\xi_n{}^* \tag{1.113}$$

は,

$$\int e^{-\xi_j{}^*\xi_j} d\xi_j d\xi_j{}^* = 1 \qquad (j=1,2,\cdots,n) \tag{1.114}$$

を考慮しつつ, (1.106)の変数変換で求まる. (微分は, G-奇要素であって, 微分演算子

$$\frac{\partial}{\partial \xi_j} \tag{1.115}$$

を左から作用させ, 符号に注意しながら移動させて ξ_j を取り除く, 左微分として定義する.)

さて, 本題にもどろう. (1.100)の $|\xi\rangle$ は真空 $|0\rangle$

$$a|0\rangle = 0 \tag{1.116}$$

が G-偶であるとして

$$\begin{aligned} |\xi\rangle &= e^{a^\dagger\xi}|0\rangle \\ &= |0\rangle - \xi|1\rangle \end{aligned} \tag{1.117}$$

で求められる. 2番目の式では, 指数を展開し

$$a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$$

と書き, $a, a^\dagger$ が G-奇要素であること,

$$\{a,\xi\} = \{a,\xi^*\} = \{a^\dagger,\xi\} = \{a^\dagger,\xi^*\} = 0 \tag{1.118}$$

などを用いた. (1.100)の成立は, $e^{a^\dagger\xi}$ が a のシフトをひきおこすこと

$$e^{-a^\dagger\xi} a e^{a^\dagger\xi} = a + \xi \tag{1.119}$$

に気がつけば理解できる. Bose 系のコヒーレント状態にはなかった

$$\langle\xi|a = \langle\xi|\xi \tag{1.120}$$

$$\begin{aligned} \langle\xi| &= \langle 0|\delta(\xi - a) \\ &= \frac{1}{i}(\langle 0|\xi - \langle 1|) \end{aligned} \tag{1.121}$$

も作れる*. (1.120)は, (1.121)で

$$\delta(\xi-a)a = \delta(\xi-a)\xi \tag{1.122}$$

が成立することから明らかである. 単位の分解式

$$\int |\xi\rangle\langle\xi| d\xi = \boldsymbol{I} \tag{1.123}$$

の証明は, (1.117)と(1.121)を用い, ξ を符号に注意しながら移して, 最後に(1.103)の積分公式を用いると, 完全性

$$\sum_{n=0}^{1} |n\rangle\langle n| = \boldsymbol{I}$$

が得られるという手順で確かめられる.

$a^\dagger$ のコヒーレント状態は

$$\langle\xi^*|a^\dagger = \langle\xi^*|\xi^* \tag{1.124}$$

$$a^\dagger|\xi^*\rangle = \xi^*|\xi^*\rangle \tag{1.125}$$

で

$$\langle\xi^*| = \langle 0|e^{\xi^* a} \tag{1.126}$$

$$|\xi^*\rangle = \delta(a^\dagger-\xi^*)|0\rangle \tag{1.127}$$

と求まる. (1.123)と同様に,

$$\int d\xi^* |\xi^*\rangle\langle\xi^*| = \boldsymbol{I} \tag{1.128}$$

が成立する. この証明は前と同様である. $a^\dagger$ の状態は, すべて以下の共役演算 * から得られることに注意しよう**.

状態ベクトル	:	$\vert\cdot\rangle$	$\overset{*}{\longleftrightarrow}$	$\langle\cdot\vert$
演算子	:	AB	$\overset{*}{\longleftrightarrow}$	$B^\dagger A^\dagger$
G 数	:	$\xi_j\xi_k$	$\overset{*}{\longleftrightarrow}$	$\xi_k{}^*\xi_j{}^*$
c 数	:	c	$\overset{*}{\longleftrightarrow}$	c^*

* これは, a が Bose 系のときと異なって有界な演算子であることによる.

** 積分公式に i をつけたことにより, 共役演算で(1.103)の1行目が互いに移り変われるようになったことに注意しよう.

コヒーレント状態の間の内積は，

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \delta(\xi' - \xi), \qquad \langle \xi'^* | \xi^* \rangle = \delta(\xi'^* - \xi^*) \tag{1.129}$$

$$\langle \xi^* | \xi \rangle = e^{\xi^* \xi}, \qquad \langle \xi | \xi^* \rangle = e^{-\xi^* \xi} \tag{1.130}$$

で与えられる．これらを示すには，(1.119)と

$$e^{\xi^* a} a^\dagger e^{-\xi^* a} = a^\dagger + \xi^* \tag{1.131}$$

を用いればよいが，(1.130)の右側の式は少し面倒なので導いておこう．(1.121)と(1.127)より

$$\begin{aligned}
\langle \xi | \xi^* \rangle &= \langle 0 | \delta(\xi - a) \delta(a^\dagger - \xi^*) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \delta(\xi - a) \int e^{\lambda(a^\dagger - \xi^*)} d\lambda | 0 \rangle \\
&= \int \langle 0 | e^{-\lambda a^\dagger} \delta(\xi - a) e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda \xi^*} d\lambda | 0 \rangle \\
&= \int \langle 0 | \delta(\xi + \lambda - a) | 0 \rangle e^{-\lambda \xi^*} d\lambda = \int \delta(\xi + \lambda) e^{-\lambda \xi^*} d\lambda \\
&= e^{\xi \xi^*} = e^{-\xi^* \xi} = \text{右辺}
\end{aligned}$$

ここで，2 行目で δ 関数の Fourier 変換(1.111)を用い，3 行目へは $\langle 0| = \langle 0| e^{-\lambda a^\dagger}$ に留意し，4 行目へは(1.119)を用いた．

Fermi 粒子のコヒーレント状態は，$a, a^\dagger$ の固有状態という意味では Bose 系のそれと似ており，おなじ名前を与えられているが，構造上は(1.120)と(1.125)の存在から，$\xi \leftrightarrow q$，$\xi^* \leftrightarrow p$ という対応関係が(1.100)，(1.120)，(1.124)，(1.125)，(1.129)，(1.130)と(1.13)～(1.17)を比較することから見てとれる．いままでは主に 1 自由度で議論してきたが，n 自由度系への拡張は容易である．

$$|(\xi)_n\rangle = \exp(a^\dagger \cdot \xi) |0\rangle \tag{1.132}$$

$$\langle (\xi)_n | = \langle 0 | \delta^{(n)}(\xi - a) \tag{1.133}$$

$$\langle (\xi)_n{}^* | = \langle 0 | \exp(\xi^* \cdot a) \tag{1.134}$$

$$|(\xi)_n{}^* \rangle = \tilde{\delta}^{(n)}(a^\dagger - \xi^*) |0\rangle \tag{1.135}$$

$$\int |(\xi)_n\rangle \langle (\xi)_n | d^n \xi = \boldsymbol{I} \tag{1.136}$$

$$\int d^n\xi^* |(\xi)_n{}^*\rangle\langle(\xi)_n{}^*| = I \tag{1.137}$$

$$\langle(\xi')_n|(\xi)_n\rangle = \delta^{(n)}(\xi'-\xi), \quad \langle(\xi')_n{}^*|(\xi)_n{}^*\rangle = \tilde{\delta}^{(n)}(\xi'^*-\xi^*) \tag{1.138}$$

$$\langle(\xi)_n{}^*|(\xi)_n\rangle = e^{(\xi^*\cdot\xi)}, \quad \langle(\xi)_n|(\xi)_n{}^*\rangle = e^{-(\xi^*\cdot\xi)} \tag{1.139}$$

ただし，

$$(a^\dagger\cdot\xi) \equiv \sum_{k=1}^{n} a_k{}^\dagger\xi_k \tag{1.140}$$

$$\delta^{(n)}(\xi-a) \equiv \delta(\xi_1-a_1)\delta(\xi_2-a_2)\cdots\delta(\xi_n-a_n) \tag{1.141}$$

$$\tilde{\delta}^{(n)}(a^\dagger-\xi^*) \equiv \delta(a_n{}^\dagger-\xi_n{}^*)\delta(a_{n-1}{}^\dagger-\xi_{n-1}{}^*)\cdots\delta(a_1{}^\dagger-\xi_1{}^*) \tag{1.142}$$

で，$d^n\xi, d^n\xi^*$ はそれぞれ(1.109)と(1.113)で定義されている．

トレース公式は

$$\mathrm{Tr}\,A = \int\langle(\xi)_n|A|(-\xi)_n\rangle d^n\xi \tag{1.143}$$

という，**反周期境界条件**(anti-periodic boundary condition)で与えられる(Bose 系のときの周期条件(1.70)を思い出そう)．これを証明しよう．粒子数表示

$$|m,r\rangle = a_{i_1}{}^\dagger a_{i_2}{}^\dagger\cdots a_{i_m}{}^\dagger|0\rangle \qquad (i_1>i_2>\cdots>i_m) \tag{1.144}$$

($r\,(=1,2,\cdots,{}_nC_m)$は n 個の粒子から m 個を選び出す場合の数)で，トレース公式は

$$\mathrm{Tr}\,A = \sum_{m=0}^{n}\sum_{r=1}^{{}_nC_m}\langle m,r|A|m,r\rangle \equiv \sum_{m,r}\langle m,r|A|m,r\rangle$$

と書ける．A は G-偶要素であるとして，(1.136)を用いて，

$$\mathrm{Tr}\,A = \sum_{m,r}\int\langle m,r|(\xi)_n\rangle\langle(\xi)_n|d^n\xi A|m,r\rangle$$

を得る．ここに，(1.144)の共役状態と(1.100)(の n 自由度版)から

$$\langle m,r|(\xi)_n\rangle = \xi_{i_m}\xi_{i_{m-1}}\cdots\xi_{i_1} \tag{1.145}$$

であることに留意し，$d^n\xi$ と(1.145)を右へ移動する．まず $d^n\xi$ が $|m,r\rangle$ を通り抜けることより符号 $(-)^{mn}$ が出る．次に，(1.145)が $\langle(\xi)_n|$ を通り抜ける

に際し $(-)^{mn}$ が，最後に $|m, r\rangle$ を通り抜けて符号 $(-)^{m^2}=(-)^m$ が出る．全体の符号はこうして $(-)^{mn}\cdot(-)^{mn}\cdot(-)^m=(-)^m$ となる．(1.145)に留意すると，

$$(-)^m\langle m, r|(\xi)_n\rangle = \langle m, r|(-\xi)_n\rangle$$

と書けるので，結局，

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\, A &= \sum_{m,r}\int\langle(\xi)_n|A|m, r\rangle(-)^m\xi_{i_1}\cdots\xi_{i_m}d^n\xi \\ &= \sum_{m,r}\int\langle(\xi)_n|A|m, r\rangle\langle m, r|(-\xi)_n\rangle d^n\xi \\ &= \int\langle(\xi)_n|A|(-\xi)_n\rangle d^n\xi \end{aligned} \tag{1.143}$$

となり，証明ができた．ここで2行目へはふたたび(1.145)を考慮し，最後は完全系

$$\sum_{m,r}|m, r\rangle\langle m, r| = \boldsymbol{I}$$

を使った．

さて，以上で準備は終わる．(p, q)系での議論を思い出しながら経路積分表示を作ろう．ハミルトニアンは

$$H^{\eta}(t) = H(a^{\dagger}, a)+(\eta^{*}(t)\cdot a)+(a^{\dagger}\cdot\eta(t)) \tag{1.146}$$

ここで(1.140)の記法を導入したが，自由度を表わす指標は，いまは

$$(\eta^{*}\cdot a) \equiv \sum_{k=1}^{n}\eta^{(k)*}a^{(k)}$$

のように書くこととしよう．$\eta^{(k)}(t), \eta^{(k)*}(t)$ は G 数外場である*．(1.63)は

$$\tilde{U}^{\eta}(t_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{i}}) = \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_N{}^{\eta}\right)\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_{N-1}{}^{\eta}\right)\cdots\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_1{}^{\eta}\right) \tag{1.147}$$

$$H_j{}^{\eta} \equiv H(a^{\dagger}, a)+(\eta_j{}^{*}\cdot a)+(a^{\dagger}\cdot\eta_j) \tag{1.148}$$

---

* 連続変数 t の G 数関数の定義は，G 数が大きさをもたないため，むづかしい．以下では経路積分の意味で時間は差分化されており，その各時刻上に独立な G 数があるとする((1.148)を見よ)．もちろん，$\eta_j{}^{*}=\eta_j=0$ $(j\geqq j_1, j\leqq j_0)$((1.66)と同様)などは要求しておく．

である．経路積分表示にいく前に，演算子順序の議論が必要である．Fermi 粒子のときは，そのべき零性(1.99)のため α-順序が最も一般的である．その構成法は(1.25)～(1.28)でやったことを，$p\leftrightarrow\xi^*, q\leftrightarrow\xi$ の対応関係に留意しながら再現すればよい．答えは，

$$H(a^\dagger,a)=\iiint\left|\left(\xi+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\zeta\right)_n\right\rangle\left\langle\left(\xi-\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\zeta\right)_n\right|H^{[\alpha]}(\xi^*,\xi)$$
$$\times e^{-(\xi^*\cdot\zeta)}d^n\zeta d^n\xi^* d^n\xi \tag{1.149}$$

$$H^{[\alpha]}(\xi^*,\xi)\equiv\int\left\langle\left(\xi+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\zeta\right)^*_n\right|H(a^\dagger,a)\left|\left(\xi-\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\zeta\right)^*_n\right\rangle$$
$$\times e^{-(\zeta^*\cdot\xi)}d^n\zeta^* \tag{1.150}$$

である．(1.150)は

$$\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)a^{(k)\dagger}a^{(k)}-\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)a^{(k)}a^{(k)\dagger}\ \rightarrow\ \xi^{(k)*}\xi^{(k)} \tag{1.151}$$

つまり，$\alpha=1/2$ のとき(ノーマル順序)

$$a^{(k)\dagger}a^{(k)}\ \rightarrow\ \xi^{(k)*}\xi^{(k)} \tag{1.152}$$

$\alpha=0$ のとき(Weyl 順序)

$$\frac{1}{2}(a^{(k)\dagger}a^{(k)}-a^{(k)}a^{(k)\dagger})\ \rightarrow\ \xi^{(k)*}\xi^{(k)} \tag{1.153}$$

$\alpha=-1/2$ のとき(反ノーマル順序)

$$a^{(k)}a^{(k)\dagger}\ \rightarrow\ \xi^{(k)}\xi^{(k)*} \tag{1.154}$$

を与える．

単位の分解式(1.136)を(1.147)に入れて，

$$\tilde{U}^\eta(t_\mathrm{f},t_\mathrm{i})=\lim_{N\to\infty}\int|(\xi_N)_n\rangle\prod_{j=1}^{N}\left\{\int\langle(\xi_j)_n|d^n\xi_j\left(1-\frac{\Delta t}{\hbar}H_j^\eta\right)|(\xi_{j-1})_n\rangle\right\}$$
$$\times\langle(\xi_0)_n|d^n\xi_0 \tag{1.155}$$

であるから，行列要素

$$\int\langle(\xi_j)_n|d^n\xi_j H(a^\dagger,a)|(\xi_{j-1})_n\rangle \tag{1.156}$$

に(1.149)を用いると，

$$(1.156) = \iiiint \delta^{(n)}\left(\xi_j - \xi - \left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\zeta\right)\delta^{(n)}\left(\xi - \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\zeta - \xi_{j-1}\right)H^{[\alpha]}(\xi^*, \xi)$$
$$\times e^{-(\xi^*\cdot\zeta)}d^n\zeta d^n\xi^* d^n\xi d^n\xi_j$$

ただし(1.138)の左側の式を用いた．$d^n\xi$ と $(d^n\zeta d^n\xi^*)$ を入れ換えて δ 関数を積分し，($H^{[\alpha]}$ は G-偶)

$$(1.156) = \iiint \delta^{(n)}(\xi_j - \xi_{j-1} - \zeta)d^n\zeta H^{[\alpha]}\left(\xi^*, \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\zeta + \xi_{j-1}\right)e^{-(\xi^*\cdot\zeta)}$$
$$\times d^n\xi^* d^n\xi_j$$

を得る．次に $d^n\zeta$ と δ 関数の積分からでる $(-)^n$ を $d^n\xi^*$ と $d^n\xi_j$ の入れ換えで吸収すると，結局

$$(1.156) = \iint e^{-\{\xi_j^*\cdot(\xi_j-\xi_{j-1})\}}H^{[\alpha]}(\xi_j^*, \xi_j^{(\alpha)})d^n\xi_j d^n\xi_j^* \qquad (1.157)$$

ただし

$$\xi_j^{(\alpha)} \equiv \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\xi_j + \left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\xi_{j-1} \qquad (1.158)$$

はすべての自由度について共通と理解する．(記述が煩雑になるので自由度の指標は省いた.) (1.157)で ξ^* を ξ_j^* と書いた．(1.157)を用いれば(1.155)は

$$\tilde{U}^{\eta}(t_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{i}}) = \lim_{N\to\infty}\int |(\xi_N)_n\rangle \prod_{j=1}^{N}\left\{\iint d^n\xi_j d^n\xi_j^* \exp\left[-(\xi_j^*\cdot\Delta\xi_j)\right.\right.$$
$$\left.\left. -\frac{\Delta t}{\hbar}\{H^{[\alpha]}(\xi_j, \xi_j^{(\alpha)}) + (\eta_j^*\cdot\xi_j) + (\xi_j^*\cdot\eta_j)\}\right]\right\}\langle(\xi_0)_n| d^n\xi_0$$
$$(1.159)$$

となる．もちろん $O((\Delta t)^2)$ 原理を用いた．また，(1.46)の記法

$$\Delta\xi_j \equiv \xi_j - \xi_{j-1} \qquad (1.160)$$

を導入した．トレース公式(1.143)の A として，(1.159)で与えられる $\tilde{U}^{\eta}$ を採れば，

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{\eta}) \equiv \mathrm{Tr}\ \tilde{U}^{\eta}(t_\mathrm{f}, t_\mathrm{i}) = \int \langle (\xi)_n | \tilde{U}^{\eta}(t_\mathrm{f}, t_\mathrm{i}) | (-\xi)_n \rangle d^n \xi$$

$$= \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \iint d^n \xi_j d^n \xi_j^* \exp\left[-\sum_{j=1}^{N} \left\{ (\xi_j \cdot \varDelta \xi_j) + \frac{\varDelta t}{\hbar} (H^{[\alpha]}(\xi_j^*, \xi_j^{(\alpha)}) \right.\right.$$

$$\left.\left. + (\eta_j^* \cdot \xi_j) + (\xi_j^* \cdot \eta_j)) \right\} \right] \Bigg|_{\mathrm{AP}} \tag{1.161}$$

となる．“AP”は反周期境界条件(anti-periodic)

$$\xi_N^{(k)} = -\xi_0^{(k)} \qquad (k=1, 2, \cdots, n) \tag{1.162}$$

を表わす．最後の式へいくとき，(1.159)を $\langle (\xi)_n |$ と $| (-\xi)_n \rangle$ ではさむことから生ずる2つの δ 関数を $d^n\xi_0$ と $d^n\xi$ で積分した．そのとき残った条件が(1.162)である．

こうして，(1.161)で Fermi 系の経路積分公式が得られたわけである．

2

摂動論とWKB法

前章で議論した (p,q) 系，$(a^\dagger,a)$ の Bose 系，および Fermi 系の経路積分表示を実際に物理の問題として考えるとき，正確に計算できるのは調和振動子の場合だけであり，一般には何らかの近似方法が必要になる．この章では，調和振動子に対して，実際に計算を試みる．ついで摂動論を議論し，経路積分法での特徴的な近似法である WKB 法を考察する．最後に，現実的な例題として，インスタントン解とよばれる解が存在する場合をくわしく計算してみよう．

2-1 調和振動子

(p,q) 系からはじめよう．ハミルトニアンは

$$H=\frac{P^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2Q^2 \tag{2.1}$$

で，m は質量，ω は角振動数である．さて，このとき，(1.76)は

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J})=\lim_{N\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}}dq_j\right)\exp\left[-\frac{S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}(q)}{\hbar}\right]\Bigg|_{\text{periodic}} \tag{2.2}$$

と書ける．ただし

$$S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}(q) \equiv \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{m}{2\Delta t}(\Delta q_j + i\Delta t K_j)^2 + \Delta t\left(\frac{m\omega^2}{2}q_j{}^2 + q_j J_j\right)\right]$$
$$= \sum_{j=1}^{N}\Delta t\left[-\frac{m}{2}K_j{}^2 + \frac{m}{2}\left(\frac{\Delta q_j}{\Delta t}\right)^2 + \frac{m\omega^2}{2}q_j{}^2 + q_j\left(J_j - im\frac{\Delta K_{j+1}}{\Delta t}\right)\right] \quad (2.3)^*$$

は，(Euclid 化された)作用とよばれる．(2.3)の 2 行目の等式は，周期条件(1.74)と外場の条件(1.66)を考慮しつつ，次のような“部分積分”

$$\sum_{j=1}^{N}\Delta q_j K_j = \sum_{j=1}^{N}(-q_j \Delta K_{j+1})$$

を行なって導かれる．ここに $\Delta K_{j+1} = K_{j+1} - K_j$ である．$S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}$ の古典運動方程式

$$\left.\frac{\partial S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}}{\partial q_j}\right|_{q_j{}^{\mathrm{c}}} = 0 \qquad (2.4)$$

の解，$q_j{}^{\mathrm{c}}$ のまわりで，$S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}$ を次のように展開する．

$$S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}(q) = S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}(q^{\mathrm{c}}) + \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N}(q_j - q_j{}^{\mathrm{c}})A_{jk}(q_k - q_k{}^{\mathrm{c}})$$

ここに，係数行列 A_{jk} は

$$A_{jk} \equiv \left.\frac{\partial^2 S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}}{\partial q_j \partial q_k}\right|_{q^{\mathrm{c}}} \qquad (2.5)$$

で与えられる．また，$S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}$ の 3 回微分以上はいまの場合ない．積分変数を

$$q_j - q_j{}^{\mathrm{c}} \rightarrow q_j$$

とシフトすれば，(2.2)は

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \lim_{N\to\infty} e^{-S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}(q^{\mathrm{c}})/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}}dq_j\right)\exp\left[-\frac{1}{2\hbar}\sum_{j,k=1}^{N}q_j A_{jk} q_k\right]\Bigg|_{\mathrm{periodic}}$$
$$= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{\Delta t}\right)^{N/2}(\det A_{jk})^{-1/2}e^{-S_{\mathrm{E}}^{\boldsymbol{J}}(q^{\mathrm{c}})/\hbar} \qquad (2.6)$$

となる．ここで 2 行目の等式は Gauss 積分公式を一般化した公式

---

* q_j の足をそろえるため，(1.39)で $\alpha = -1/2$ とした．

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 \cdots dq_N \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N} q_j A_{jk} q_k\right) = (2\pi)^{N/2}(\det A_{jk})^{-1/2} \quad (2.7)$$

を用いて導かれる．ここに，$\det A_{jk}$ は A_{jk} の行列式である．したがって(2.6)を計算するにあたって実際必要なことは，運動方程式(2.4)を周期条件の下に解いて，(2.5)の行列式を計算することである．古典的運動方程式(2.4)は，

$$-\frac{m}{(\Delta t)^2}(q_{j+1}{}^{c}-2q_j{}^{c}+q_{j-1}{}^{c})+m\omega^2 q_j{}^{c}+J_j-\frac{im}{\Delta t}(K_{j+1}-K_j) = 0 \quad (2.8)$$

であるが，いまや $q_j{}^{c}$ は積分変数でないから，$\Delta t\to 0$ $(N\to\infty)$ の連続極限で考えてよく，

$$\left(-\frac{d^2}{dt^2}+\omega^2\right)q^{c}(t) = i\dot{K}(t)-\frac{J(t)}{m} \quad (2.9)$$

となる．ドットは時間微分を表わす．(2.9)は，(2.3)でナイーヴに $\Delta t\to 0$ として得られる作用から導かれる**古典的な運動方程式**であり，経路積分中での古典論の果たす役目に注意してほしい．(2.9)を解くために，周期条件 $G_r(t_{\mathrm{f}})=G_r(t_{\mathrm{i}})$ をみたす固有関数を考えよう．

$$G_r(t) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}}(F_r(t)+F_r(t)^*) & (r\geqq 1) \\ F_0(t) & (r=0) \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}\,i}(F_r(t)-F_r(t)^*) & (r\leqq -1) \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\sum_{r=-\infty}^{\infty} G_r(t)G_r(t') = \delta(t-t'), \qquad \int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}} dt G_r(t)G_s(t) = \delta_{rs}$$

ただし，ここで $F_r(t_{\mathrm{f}})=F_r(t_{\mathrm{i}})$，

$$\begin{aligned} &F_r(t) \equiv \frac{1}{\sqrt{T}}e^{i2\pi rt/T} \qquad (r=0,\pm 1,\pm 2,\cdots) \\ &\sum_{r=-\infty}^{\infty} F_r(t)F_r(t')^* = \delta(t-t'), \qquad \int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}} dt F_r{}^*(t)F_s(t) = \delta_{rs} \end{aligned} \quad (2.11)$$

であり，また $T\equiv t_{\mathrm{f}}-t_{\mathrm{i}}$ とおいた．(2.11)では，公式

$$\frac{1}{T}\sum_{r=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi r(t-t')/T} = \delta(t-t') \tag{2.12}$$

を用いた．$q^{\mathrm{c}}(t)$ と外場を，この固有関数で次のように展開する．

$$q^{\mathrm{c}}(t) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} q_r G_r(t), \qquad J(t) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} J_r G_r(t)$$

（K についても同様.）(2.9)にこれらを代入して，

$$-\frac{d^2}{dt^2}G_r(t) = \left(\frac{2\pi r}{T}\right)^2 G_r(t) \tag{2.13}$$

に注意すると，$q^{\mathrm{c}}(t)$ は，

$$q^{\mathrm{c}}(t) = \int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}} dt' \varDelta(t-t')\left(i\dot{K}(t') - \frac{J(t')}{m}\right) \tag{2.14}$$

と書ける．ただし，

$$\begin{aligned} \varDelta(t) &\equiv \frac{T}{(2\pi)^2}\sum_{r=-\infty}^{\infty}\frac{e^{i2\pi rt/T}}{r^2+\left(\frac{\omega T}{2\pi}\right)^2} \\ \left(-\frac{d^2}{dt^2}+\omega^2\right)\varDelta(t) &= \delta(t) \end{aligned} \tag{2.15}$$

は，周期的 Green 関数である．((2.15)の下側の式では，(2.12)を用いた.) その具体的な形は，公式

$$\sum_{r=-\infty}^{\infty}\frac{e^{irx}}{r^2+a^2} = \frac{\pi}{a\sinh a\pi}\{\theta(x)\cosh a(\pi-x)+\theta(-x)\cosh a(\pi+x)\} \tag{2.16}$$

（$\theta(x)$ は(1.60)で導入した階段関数）を利用して，

$$\varDelta(t) = \frac{1}{2\omega\sinh\frac{\omega T}{2}}\left\{\theta(t)\cosh\omega\left(\frac{T}{2}-t\right)+\theta(-t)\cosh\omega\left(\frac{T}{2}+t\right)\right\} \tag{2.17}$$

と計算できる．（いま，$|t| \leqq T$ である.）

(2.14)を，(2.3)で $\varDelta t\to 0$ の極限をとったものに代入し

$$S_E{}^J(q^c) = \int_{t_i}^{t_f} dt\left[-\frac{m}{2}K^2+\frac{m}{2}(\dot{q}^c)^2+\frac{m\omega^2}{2}(q^c)^2+q^c(J-im\dot{K})\right]$$
$$= m\int_{t_i}^{t_f} dt\left[-\frac{1}{2}K^2(t)-\frac{1}{2}\int_{t_i}^{t_f} dt'\left(i\dot{K}(t)-\frac{J(t)}{m}\right)\Delta(t-t')\right.$$
$$\left.\times\left(i\dot{K}(t')-\frac{J(t')}{m}\right)\right] \tag{2.18}$$

が得られる．（部分積分から出てくる表面項，$[q^c(t)\dot{q}^c(t)]_{t_i}^{t_f}$，は $\dot{\Delta}(t_f-t)=\dot{\Delta}(t_i-t)$ のため落ちる.）

次に，A_{jk} の行列式を計算しよう．これは差分形で行なわなければならない．(2.5)は

$$A_{jk} = -\frac{m}{\Delta t}(\delta_{j+1,k}+\delta_{j,k+1}-2\delta_{jk})+m\omega^2\Delta t\,\delta_{jk} \tag{2.19}$$

行列のかたちでは,

$$A_{jk} = \frac{m}{\Delta t}\begin{pmatrix} \alpha & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & \alpha & -1 & \ddots & & 0 \\ 0 & -1 & \alpha & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & \alpha \end{pmatrix} \quad (j,k=1,2,\cdots,N) \tag{2.20}$$

と書ける．ただし $\alpha\equiv 2+(\omega\Delta t)^2$ である．(2.20)の A_{1N}，A_{N1} 成分は周期条件のため現われたことに注意しよう．行列式を計算するのは通常の余因子展開でやればよい．答えは，$O((\Delta t)^2)$ は無視して

$$\det A_{jk} = \left(\frac{m}{\Delta t}\right)^N\{(1+\omega\Delta t)^{N-1}+(1-\omega\Delta t)^{N-1}-2\} \tag{2.21}$$

となる．(2.21)を(2.6)に代入して，$N\to\infty$ をとると，

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \frac{1}{2\sinh\dfrac{\omega T}{2}}\exp\left[-\frac{S_E{}^J(q^c)}{\hbar}\right] \tag{2.22}$$

と最終的な答えが計算できた($S_E{}^J(q^c)$ は(2.18)である).

$S_E{}^J(q^c)$ を差分形のままで計算することもできる．このときは，(2.11)の代

わりに，$F_r(0)=F_r(N)$ という条件から求まる表式，

$$F_r(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i2\pi rj/N} \qquad (1 \leqq r \leqq N,\ 1 \leqq j \leqq N) \tag{2.23}$$

を用いてまったく同様にやればよい．このとき，(2.17)は

$$\Delta_{jk} = \frac{1}{2\omega \sinh \frac{\omega T}{2}} \left[\theta_{j,k+1} \cosh \omega \left\{ \frac{T}{2} - \Delta t(j-k) \right\} + \theta_{kj} \cosh \omega \left\{ \frac{T}{2} + \Delta t(j-k) \right\} \right] \tag{2.24}$$

となる．ただし

$$\theta_{jk} \equiv \begin{cases} 1 & (j \geqq k) \\ 0 & (j \leqq k-1) \end{cases} \tag{2.25}$$

として，他の量は(2.18)で差分化をナイーヴにやればよい．

さて次に，Feynman 核(1.77)を計算してみよう．いまとまったく同様に，

$$\tilde{K}^J(q_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; q_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} dq_j \exp\left[-\frac{S_\mathrm{E}{}^J(q)}{\hbar} \right] \Bigg|_{q_N=q_\mathrm{f},\, q_0=q_\mathrm{i}} \tag{2.26}$$

において，(2.2)の周期境界条件の代わりに，

$$q^\mathrm{c}(t_\mathrm{f}) = q_\mathrm{f}, \qquad q^\mathrm{c}(t_\mathrm{i}) = q_\mathrm{i} \tag{2.27}$$

の境界条件をみたす古典解を考える．解は，

$$q^\mathrm{c}(t) = q_0(t) + \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} dt' \bar{\Delta}(t, t') \left(i\dot{K}(t') - \frac{J(t')}{m} \right) \tag{2.28}$$

となる．ただし，$q_0(t)$ は外場のない(2.9)をみたし，境界条件(2.27)に従う解，

$$q_0(t) = \frac{1}{\sinh \omega T} [q_\mathrm{f} \sinh \omega(t-t_\mathrm{i}) + q_\mathrm{i} \sinh \omega(t_\mathrm{f}-t)] \tag{2.29}$$

であり，$\bar{\Delta}(t, t')$ は境界 $t=t_\mathrm{f}$，$t=t_\mathrm{i}$ で消える固有関数，$\hat{G}_r(t_\mathrm{f})=\hat{G}_r(t_\mathrm{i})=0$，

$$\begin{gathered} \hat{G}_r(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin\left[\frac{\pi r}{T}(t-t_\mathrm{i}) \right] \qquad (r \geqq 1) \\ \sum_{r=1}^{\infty} \hat{G}_r(t) \hat{G}_r(t') = \delta(t-t'), \qquad \int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} dt \hat{G}_r(t) \hat{G}_s(t) = \delta_{rs} \end{gathered} \tag{2.30}$$

で作られる Green 関数

$$\bar{\Delta}(t,t') = \frac{1}{T}\sum_{r=1}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{\pi r}{T}\right)^2+\omega^2}\left[\cos\frac{\pi r}{T}(t-t')-\cos\frac{\pi r}{T}(t+t'-2t_{\rm i})\right]$$

$$= \frac{1}{\omega\sinh\omega T}[\theta(t-t')\sinh\omega(t_{\rm f}-t)\sinh\omega(t'-t_{\rm i})$$

$$+\theta(t'-t)\sinh\omega(t_{\rm f}-t')\sinh\omega(t-t_{\rm i})] \tag{2.31}$$

である．ここで公式

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos nx}{n^2+a^2} = \frac{\pi}{2a\sinh a\pi}[\theta(x)\cosh a+\theta(-x)\cosh a(\pi+x)]-\frac{1}{2a^2}$$

$$(0\leqq x<2\pi)$$

を用いた．(2.28)，(2.31)により，$S_{\rm E}{}^{J}(q^{\rm c})$ は，(いまそれを $S_{\rm c}{}^{J}$ と書いて) (2.3)に代入し(連続表示をとっ)て

$$S_{\rm c}{}^{J} = \frac{m\omega}{2\sinh\omega T}[(q_{\rm f}{}^2+q_{\rm i}{}^2)\cosh\omega T-2q_{\rm f}q_{\rm i}]$$

$$-\frac{m}{\sinh\omega T}\int_{t_{\rm i}}^{t_{\rm f}}dt\left(i\dot{K}(t)-\frac{J(t)}{m}\right)(q_{\rm f}\sinh\omega(t-t_{\rm i})+q_{\rm i}\sinh\omega(t_{\rm f}-t))$$

$$-m\int_{t_{\rm i}}^{t_{\rm f}}dt\left[\frac{K^2(t)}{2}+\frac{1}{2}\int_{t_{\rm i}}^{t_{\rm f}}dt'\left(i\dot{K}(t)-\frac{J(t)}{m}\right)\bar{\Delta}(t,t')\left(i\dot{K}(t')-\frac{J(t')}{m}\right)\right] \tag{2.32}$$

と求まる．(最初の2項は，部分積分の表面項から出てくる．)

つぎにやることは，行列式の計算である．行列 A_{jk} の成分は(2.19)で与えられたものとほとんど同じであるが，いまの場合，境界条件が周期条件ではなく

$$q_N{}^{\rm Q} = q_0{}^{\rm Q} = 0$$

であることを考慮すると*，次のような $(N-1)\times(N-1)$ 行列

---

* 変数 q をいま，$q_j=q_j{}^{\rm c}+q_j{}^{\rm Q}$ ととっており，A_{jk} は $q_j{}^{\rm Q}q_k{}^{\rm Q}$ の係数行列であったことを思い出そう．q_j の境界条件 $q_N=q_{\rm f}$，$q_0=q_{\rm i}$ は $q_j{}^{\rm c}$ が担っているので，$q_j{}^{\rm Q}$ の境界条件はこうなる．

$$A_{jk}=\frac{m}{\Delta t}\begin{pmatrix}\alpha & -1 & 0 & \cdots & 0\\ -1 & \alpha & -1 & \ddots & \vdots\\ 0 & -1 & \alpha & \ddots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1\\ 0 & \cdots & 0 & -1 & \alpha\end{pmatrix} \tag{2.33}$$

(α は(2.20)で与えたもの．(2.20)の右上と左下の成分がないことに注意)の行列式は，ふたたび余因子展開で

$$\det A_{jk}=\left(\frac{m}{\Delta t}\right)^{N-1}\frac{(1+\omega\Delta t)^{N-1}-(1-\omega\Delta t)^{N-1}}{2\omega\Delta t} \tag{2.34}$$

となり，(2.6)に相当する式に代入して，$N\to\infty$ をとれば

$$\tilde{K}^{J}(q_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{f}};q_{\mathrm{i}},t_{\mathrm{i}})=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\omega T}}\exp\left[-\frac{S_{\mathrm{c}}{}^{J}}{\hbar}\right] \tag{2.35}$$

が求まる($S_{\mathrm{c}}{}^{J}$ は(2.32)である)．(2.35)が

$$\tilde{K}^{J}(q_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{f}};q_{\mathrm{i}},t_{\mathrm{i}})=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}\left(-\frac{\partial^2 S_{\mathrm{c}}{}^{J}}{\partial q_{\mathrm{f}}\partial q_{\mathrm{i}}}\right)}\exp\left[-\frac{S_{\mathrm{c}}{}^{J}}{\hbar}\right] \tag{2.36}$$

と書けることに注意しよう．((2.32)を見よ.)

ここで Euclid 化の方法のチェックをしてみよう．(2.22)で $T\to\infty$，$t\to it$ とおいてみる．まず(2.17)で

$$\Delta(t)\xrightarrow[T\to\infty]{t\to it}\frac{1}{2\omega}\left[\theta(t)e^{-i\omega t}+\theta(-t)e^{i\omega t}\right]\equiv\Delta_{\mathrm{F}}(t) \tag{2.37}$$

が得られる．Δ_{F} を Feynman 伝搬関数とよぶ．($t>0$ あるいは $t<0$ としておいて $t\to it$ とするから，階段関数はそのままのかたちで残る.)(2.18)は，外場の性質(1.66)を用いて，

$$\begin{aligned}S_{\mathrm{E}}{}^{J}(q^{\mathrm{c}})\xrightarrow[T\to\infty]{t\to it} im\int_{T_0}^{T_1}dt\Bigg[-\frac{K^2(t)}{2}-\frac{i}{2}\int_{T_0}^{T_1}dt'\left(\dot{K}(t)-\frac{J(t)}{m}\right)\\ \times\Delta_{\mathrm{F}}(t-t')\left(\dot{K}(t')-\frac{J(t')}{m}\right)\Bigg]\equiv -iS^{J}(q^{\mathrm{c}})\end{aligned} \tag{2.38}$$

となる．こうして $\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J})$ は

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) \xrightarrow[T\to\infty]{t\to it} e^{-\omega T/2} \exp\left[i \frac{S^J(q^c)}{\hbar} \right] \tag{2.39}$$

のようにふるまう．(2.38)が Green 関数の母関数そのものと等しいことは，(1.58)から出発して直接計算してみればただちにわかる．

(2.35)のほうも同様である．(2.31)は，

$$\bar{\Delta}(t) \xrightarrow[T\to\infty]{t\to it} \frac{1}{2\omega}\left[\theta(t)e^{-i\omega t} + \theta(-t)e^{i\omega t}\right] = \Delta_{\mathrm{F}}(t)$$

のように(2.37)と等しくなる．(2.32)は

$$S_c{}^J \xrightarrow[T\to\infty]{t\to it} \frac{m\omega}{2}(q_{\mathrm{f}}{}^2 + q_{\mathrm{i}}{}^2) + S^J(q^c) \tag{2.40}$$

で，(2.35)は

$$\tilde{K}^J \xrightarrow[T\to\infty]{t\to it} e^{-\omega T/2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(q_{\mathrm{f}}{}^2 + q_{\mathrm{i}}{}^2) \right] \exp\left[i \frac{S^J(q^c)}{\hbar} \right] \tag{2.41}$$

となる．外場依存性は期待されたとおり(2.39)と一致する．(1.71)，および(1.75)の 2 行目の括弧の中を思い出すと，(2.39)および(2.41)と比べて，調和振動子の基底状態のエネルギーが

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{2.42}$$

であり，また基底状態の波動関数が

$$\langle q|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega q^2/2\hbar} \tag{2.43}$$

であることがわかる．われわれは純粋に経路積分の言葉だけを用いて，(2.42)，(2.43)などを導き出すことに成功したわけで，ここに Euclid 化の強みがある．

次に，Bose 系 $(a^\dagger, a)$ では，調和振動子は

$$H(a^\dagger, a) = \hbar\omega a^\dagger a \tag{2.44}$$

で与えられる．この場合，(1.93)に代入した，

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Bose}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \iint \frac{d^2 z_j}{\pi} \exp\Big[-\sum_{j=1}^{N} \{ z_j{}^* \Delta z_j + \omega \Delta t z_j{}^* z_{j-1} + \Delta t (z_j{}^* \eta_j + \eta_j{}^* z_{j-1})\} \Big]\Big|_{\mathrm{periodic}} \tag{2.45}$$

が出発点である($\eta_j \to \hbar\eta_j$ とスケールした). 周期条件を考慮して, 固有関数(2.23)で z_j, η_j を

$$z_j = \sum_{r=1}^{N} F_r(j) \hat{z}_r, \qquad \eta_j{}^* = \sum_{r=1}^{N} F_r^*(j) \hat{\eta}_r{}^*$$

などと展開する. こうした変換のヤコビアンは, 完全性と直交性,

$$\sum_{r=1}^{N} F_r(j) F_r^*(k) = \delta_{jk}, \qquad \sum_{j=1}^{N} F_r^*(j) F_s(j) = \delta_{rs} \tag{2.46}$$

があるので, ($F_r(j)$ を行列とみれば) 1 である. (2.45)の指数の肩は,

$$-\sum_{r=1}^{N} (\hat{z}_r{}^* D_r{}^{-1} \hat{z}_r + \hat{z}_r{}^* \Delta t \hat{\eta}_r + \hat{\eta}_r{}^* \Delta t\, \omega_r{}^{-1} \hat{z}_r)$$

と書ける. ただし

$$D_r{}^{-1} \equiv \omega_r{}^{-1} \{ \omega_r - (1 - \omega \Delta t) \} \tag{2.47}$$

であり, ω_r は 1 の N 乗根($r = 1, 2, \cdots, N$)

$$\omega_r = e^{i2\pi r/N}, \qquad (\omega_r)^N = 1 \tag{2.48}$$

である. 結局,

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Bose}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} \prod_{r=1}^{N} \iint \frac{d^2 \hat{z}_r}{\pi} \exp(-\hat{z}_r{}^* D_r{}^{-1} \hat{z}_r - \hat{z}_r{}^* \Delta t \hat{\eta}_r - \hat{\eta}_r{}^* \Delta t\, \omega_r{}^{-1} \hat{z}_r)$$

に到達する. $\hat{z}_r$ についての 1 次の項を消すため,

$$\begin{aligned} \hat{z}_r{}^* &\to \hat{z}_r{}^* - \Delta t \hat{\eta}_r{}^* D_r \omega_r{}^{-1} \\ \hat{z}_r &\to \hat{z}_r - \Delta t D_r \hat{\eta}_r \end{aligned} \tag{2.49}$$

なる変数変換を行なうと,

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Bose}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} \prod_{r=1}^{N} \iint \frac{d^2 \hat{z}_r}{\pi} \exp(-\hat{z}_r{}^* D_r{}^{-1} \hat{z}_r + (\Delta t)^2 \hat{\eta}_r{}^* D_r \omega_r{}^{-1} \hat{\eta}_r)$$

となる. これに Gauss 積分公式

$$\iint \frac{d^2z}{\pi} e^{-z^* A z} = \frac{1}{A} \tag{2.50}$$

を用いると，

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Bose}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} \prod_{r=1}^{N} (D_r) \exp\left[(\varDelta t)^2 \sum_{j,k=1}^{N} \eta_j{}^* D_{jk} \eta_k\right] \tag{2.51}$$

$$D_{jk} \equiv \sum_{r=1}^{N} F_r(j) D_r \omega_r{}^{-1} F_r^*(k) = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^{N} \frac{(\omega_r)^{j-k}}{\omega_r - (1-\omega\varDelta t)} \tag{2.52}$$

となる．最後で $\hat{\eta}_r$ から η_j への逆変換を用いた．これから後の計算は，Fermi 系の議論とまとめて一緒に進めることにしよう．

そこで Fermi 系の議論に移る．ハミルトニアンはふたたび(2.44)である．もちろん，$a^\dagger, a$ は反交換関係(1.98)をみたす．演算子順序は $\alpha=-1/2$ の反ノーマル順序を採用する．(2.44)を($\alpha=-1/2$ の)(1.150)に入れると，

$$H^{[-1/2]}(\xi^*, \xi) = \hbar\omega(\xi^*\xi+1)$$

が得られる．したがって(1.161)は(自由度は1とおく)

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Fermi}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \iint d\xi_j d\xi_j{}^* \exp\left[-\sum_{j=1}^{N} \{\xi_j{}^* \varDelta\xi_j + \omega\varDelta t(\xi_j{}^*\xi_j+1) + \varDelta t(\eta_j{}^*\xi_j + \xi_j{}^*\eta_j)\}\right]\Bigg|_{\mathrm{AP}} \tag{2.53}$$

となる．前と同様，$\eta_j \to \hbar\eta_j$ とスケールした．反周期条件(1.162)に従う固有関数

$$f_r(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\pi(2r+1)j/N} \qquad (1 \leqq j, r \leqq N)$$
$$f_r(0) = -f_r(N) \tag{2.54}$$

$$\sum_{r=1}^{N} f_r(j) f_r^*(k) = \delta_{jk}, \qquad \sum_{j=1}^{N} f_r^*(j) f_s(j) = \delta_{rs}$$

を導入し，

$$\xi_j = \sum_{r=1}^{N} f_r(j)\hat{\xi}_r, \qquad \eta_j{}^* = \sum_{r=1}^{N} \hat{\eta}_r{}^* f_r^*(j)$$

と展開する．前とまったく同様にやると，(2.53)は

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Fermi}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} e^{-\omega T} \prod_{r=1}^{N} \iint d\hat{\xi}_r d\hat{\xi}_r^* \exp(-\hat{\xi}_r^* S_r^{-1}\hat{\xi}_r - \hat{\xi}_r^* \Delta t \hat{\eta}_r - \hat{\eta}_r^* \Delta t \hat{\xi}_r)$$

となる．ただし，

$$S_r^{-1} \equiv -\{x_r - (1+\omega\Delta t)\} \tag{2.55}$$

で，x_r $(r=1,2,\cdots,N)$ は

$$x_r \equiv e^{-i\pi(2r+1)/N} \qquad (x_r)^N = -1 \tag{2.56}$$

という -1 の N 乗根である．$\hat{\xi}_r^*$, $\hat{\xi}_r$ の1次の項を消去するため，(2.49)のように

$$\hat{\xi}_r^* \to \hat{\xi}_r^* - \Delta t \hat{\eta}_r^* S_r$$
$$\hat{\xi}_r \to \hat{\xi}_r - \Delta t S_r \hat{\eta}_r$$

とシフトする((1.106)よりヤコビアンは1)．こうして，

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Fermi}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} e^{-\omega T} \prod_{r=1}^{N} \iint d\hat{\xi}_r d\hat{\xi}_r^* \exp(-\hat{\xi}_r^* S_r^{-1}\hat{\xi}_r + (\Delta t)^2 \hat{\eta}_r^* S_r \hat{\eta}_r)$$

が得られ，積分公式(1.112)より $\hat{\xi}_r$ と $\hat{\xi}_r^*$ に関する積分を行なって，結局

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Fermi}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty} e^{-\omega T} \prod_{r=1}^{N} (S_r^{-1}) \exp\left[(\Delta t)^2 \sum_{j,k=1}^{N} \eta_j^* S_{jk} \eta_k\right] \tag{2.57}$$

$$S_{jk} \equiv \sum_{r=1}^{N} f_r(j) S_r f_r^*(k) = -\frac{1}{N} \sum_{r=1}^{N} \frac{(x_r)^{k-j}}{x_r - (1+\omega\Delta t)} \tag{2.58}$$

となる．

残ったのは，(2.51), (2.52), (2.57), (2.58)の計算である．そのために，ω_r と x_r をまとめて，X_r と書こう．X_r が ω_r のとき添字 B(Bose)を，x_r のとき添字 F(Fermi)をつけることにして，求めるものは

$$I^{(\mathrm{B\,or\,F})}(a) \equiv \prod_{r=1}^{N} (X_r - a) \tag{2.59}$$

$$\Delta_m{}^{(\mathrm{B\,or\,F})}(a) \equiv \frac{1}{N} \sum_{r=1}^{N} \frac{(X_r)^m}{X_r - a} \qquad (-N+1 \leqq m \leqq N-1) \tag{2.60}$$

である．(2.59)からはじめよう．X_r が ± 1 の N 乗根であることを思い出すと，

（上（下）の符号を Bose（Fermi）と以下書いて）

$$I_N^{(\cdot)}(a) = (X_1 - a)(X_2 - a)\cdots(X_N - a)$$
$$= (-)^N(a^N \mp 1) \qquad \begin{pmatrix} \text{上 : Bose} \\ \text{下 : Fermi} \end{pmatrix} \tag{2.61}$$

となる．$\varDelta_m^{(\cdot)}(a)$ は，まず分母を展開し，

$$(X_r)^N = \pm 1$$

を用いると，

$$\varDelta_m^{(\cdot)}(a) = \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N}\frac{X_r{}^m}{(-a)}\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{X_r}{a}\right)^n\left(1 \pm \frac{1}{a^N} + \frac{1}{a^{2N}} \pm \frac{1}{a^{3N}} + \cdots\right)$$
$$= -\frac{a^{N-1}}{a^N \mp 1}\left\{\sum_{n=0}^{N-1}\frac{1}{a^n}\left(\frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N}(X_r)^{m+n}\right)\right\} \tag{2.62}$$

となる．m の範囲(2.60)を思い出すと，

$$-N+1 \leqq m+n \leqq 2N-2$$

であり，r についての和，$\sum_{r=1}^{N}(X_r)^{m+n}$，で残るのは

$$m+n = 0 \qquad (-N+1 \leqq m \leqq 0)$$

のときと

$$m+n = N \qquad (1 \leqq m \leqq N-1)$$

のときとであり，結局

$$\varDelta_m^{(\cdot)}(a) = -\frac{1}{a^N \mp 1}\{\theta_{0m}a^{N+m-1} \pm \theta_{m1}a^{m-1}\} \tag{2.63}$$

と求まる．さて，(2.51)，(2.52)は，これらの結果を用いると

$$\prod_{r=1}^{N} D_r = \frac{\prod_{r=1}^{N}\omega_r}{I_N^{(\mathrm{B})}(1-\omega\varDelta t)} = \frac{1}{1-e^{-\omega T}} \tag{2.64}$$

となる．ここで

$$\prod_{r=1}^{N}\omega_r = (-)^{N+1} \tag{2.65}$$

$$(1-\omega\varDelta t)^m = e^{-\omega m\varDelta t} \tag{2.66}$$

と(1.64)の $T=N\Delta t$ を用いた．さらに，

$$D_{jk} = \Delta_{(j-k)}{}^{(\mathrm{B})}(1-\omega\Delta t) = \frac{1}{1-e^{-\omega T}}\{\theta_{j,k+1}e^{-\omega(j-k)\Delta t}+\theta_{kj}e^{-\omega T-\omega(j-k)\Delta t}\} \tag{2.67}$$

で

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Bose}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{1-e^{-\omega T}}\exp\left[(\Delta t)^2\sum_{j,k=1}^{N}\eta_j{}^* D_{jk}\eta_k\right] \tag{2.68}$$

と求まる．Fermi 系の場合，(2.57)の

$$\prod_{r=1}^{N} S_r{}^{-1} = (-)^N I_N{}^{(\mathrm{F})}(1+\omega\Delta t) = e^{\omega T}+1 \tag{2.69}$$

となり，(2.58)は

$$S_{jk} = -\Delta_{(k-j)}{}^{(\mathrm{F})}(1+\omega\Delta t) = \frac{1}{1+e^{\omega T}}\{\theta_{jk}e^{\omega T-\omega(j-k)\Delta t}-\theta_{k,j+1}e^{\omega(k-j)\Delta t}\} \tag{2.70}$$

と求まる．したがって

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{Fermi}}(\boldsymbol{\eta}) = \lim_{N\to\infty}(1+e^{-\omega T})\exp\left[(\Delta t)^2\sum_{j,k=1}^{N}\eta_j{}^* S_{jk}\eta_k\right] \tag{2.71}$$

となって， Fermi 系の計算も完了した．

(2.67),(2.70)が $T\to\infty$ で伝搬関数

$$\langle 0|Ta(t)a^\dagger(t')|0\rangle$$

と一致することから，ふたたび Euclid 化の方法の正当性をみることができる．というのは，調和振動子では

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t}, \qquad a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t}$$

であるので，$a(0)|0\rangle=0$ より

$$\begin{aligned}\langle 0|Ta(t)a^\dagger(t')|0\rangle &= \theta(t-t')\langle 0|a(0)a(0)^\dagger|0\rangle e^{-i\omega(t-t')}\\ &= \theta(t-t')e^{-i\omega(t-t')}\end{aligned}$$

となり，(2.67),(2.70)で $T\to\infty$ $(t\to it)$ をとれば，双方ともこれと同じものになるからである．

2-2 摂動論

調和振動子の場合は $\tilde{Z}_T$ を正確に求めることができたが，多くの場合そうはいかない．ここでは，(p,q) 系を例にとり，ハミルトニアンが

$$H(P,Q) = H_0(P,Q)+gH_{\mathrm{I}}(P,Q) \tag{2.72}$$

で与えられる場合を考えよう．ただし H_0 は(2.1)の調和振動子ハミルトニアンで，g は1より小さいパラメータである．(1.73)は

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\iint\frac{dp_jdq_j}{2\pi\hbar}\exp\left[\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{i}{\hbar}p_j\Delta q_j-\frac{\Delta t}{\hbar}\{H_0(p_j,q_j{}^{(\alpha)})\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.+gH_{\mathrm{I}}{}^{[\alpha]}(p_j,q_j{}^{(\alpha)})+p_jK_j+q_jJ_j\}\right]\right]\right|_{\text{periodic}} \tag{2.73}$$

と書けるが，外場のおかげで

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \lim_{N\to\infty}\exp\left[-\frac{\Delta t}{\hbar}g\sum_{j=1}^{N}H_{\mathrm{I}}{}^{[\alpha]}\left(-\frac{\hbar}{\Delta t}\frac{\partial}{\partial K_j},\ -\frac{\hbar}{\Delta t}\frac{\partial}{\partial J_j{}^{(\alpha)}}\right)\right]\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J}) \tag{2.74}$$

$$\frac{\partial}{\partial J_j{}^{(\alpha)}} = \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\frac{\partial}{\partial J_j}+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\frac{\partial}{\partial J_{j-1}} \tag{2.75}$$

と書き換えることができる．$\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J})$ は前節(2.22)の $\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J})$ である．摂動論の基本的な立場は，(2.74)を，g が小さいので展開して計算しようということである．これを系統的に行なうために少し工夫をしよう．そのため記法を簡略化する．ベクトル記法

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varphi} &\equiv (p_1,p_2,\cdots,p_N,q_1,q_2,\cdots,q_N)\\ \boldsymbol{J} &\equiv \frac{\Delta t}{\hbar}(K_1,K_2,\cdots,K_N,J_1,J_2,\cdots,J_N)\end{aligned} \tag{2.76}$$

を導入し，(2.74)の H_{I} の外場に関する微分も，記号的に $\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{J}}$ で表わすことにする．(2.73)で相互作用のない部分を $\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J})$ と書くことにすると，これは(2.22)と(2.18)(の差分形)より

$$\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J}) = c\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N}(\boldsymbol{J})_j(\boldsymbol{\varDelta})_{jk}(\boldsymbol{J})_k\right] \\ \equiv c\exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varDelta}\boldsymbol{J}\right] \tag{2.77}$$

と表わせる．c は外場によらない部分であり，$\boldsymbol{\varDelta}$ は次の行列で表わされる．

$$(\boldsymbol{\varDelta})_{ij} \equiv \hbar\begin{pmatrix} -m\delta_{ij}-m\ddot{\varDelta}_{ij} & i\dot{\varDelta}_{ij} \\ -i\dot{\varDelta}_{ij} & -\dfrac{1}{m}\varDelta_{ij} \end{pmatrix} \tag{2.78}$$

ただし，$\varDelta_{ij}$ は(2.24)であり，ドットは，

$$\dot{\varDelta}_{ij} \equiv \frac{\varDelta_{ij}-\varDelta_{i-1,j}}{\varDelta t}, \qquad \ddot{\varDelta}_{ij} \equiv \frac{\varDelta_{i+1,j}-2\varDelta_{ij}+\varDelta_{i-1,j}}{(\varDelta t)^2}$$

を意味する．こうして，(2.74)は

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = c\exp\left[-gH_{\mathrm{I}}\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{J}}\right)\right]\exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varDelta}\boldsymbol{J}\right] \tag{2.79}$$

と表わせる．($\varDelta t/\hbar$ を g とおいた.) この表式を書き換えよう．まず，

$$F\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{J}}\right)G(\boldsymbol{J}) = G\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)F(\boldsymbol{\varphi})e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}}\bigg|_{\boldsymbol{\varphi}=0} \tag{2.80}$$

を用いる．これを示すには

$$G\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)F(\boldsymbol{\varphi})e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}} = G\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)F\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{J}}\right)e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}}$$

と書いて，G を右に移動し，$G(-\partial/\partial\boldsymbol{\varphi})e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}}=G(\boldsymbol{J})e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}}$ を用いると，

$$G\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)F(\boldsymbol{\varphi})e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}} = F\left(-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{J}}\right)G(\boldsymbol{J})e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}}$$

が得られる．両辺で $\boldsymbol{\varphi}=0$ としたものが(2.80)である．(2.80)を用いれば，(2.79)は

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = c\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varDelta}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)\exp[-gH_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\varphi})]e^{-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}}\bigg|_{\boldsymbol{\varphi}=0} \tag{2.81}$$

となる．(2.81)の右辺で，最後の2つの指数関数を展開する．

$$\sum_{m,n}\frac{1}{m!n!}(-gH_{\rm I}(\boldsymbol{\varphi}))^m(-\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J})^n \tag{2.82}$$

これに，(2.81)の微分を作用して，$\boldsymbol{\varphi}=0$ としてのこった項が $\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J})$ に寄与することになる．この過程は，以下のような Feynman ダイヤグラムを導入することで，見通しよく記述できる．

$H_I(\boldsymbol{\varphi})$ が $\boldsymbol{\varphi}$ についての k 次単項式を含んでいるとする．これは，(2.82)で $\boldsymbol{\varphi}$ についての k 次の寄与をするが，これを**ヴァーテックス**とよび，図2-1のように書く．次に $\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{J}$ からの寄与を，外場を×で記して図2-2のように表わす．直線で $\boldsymbol{\varphi}$ を表わす．添字は変数の種類と時間の足の両方を含む．微分操作は，"$\boldsymbol{\varphi}$ を2つ除去し，かわりに $\boldsymbol{\Delta}$ をおく" と読む(微分演算子項の1/2因子は，微分操作で出る余分な因子を正しく打ち消す)．(2.78)の $\boldsymbol{\Delta}$ を **(Feynman)伝搬関数*** とよぶ(図2-3)．ヴァーテックスと外場を結ぶ線を外線，ヴァーテックス同士を結ぶ線を内線ということもある．$\boldsymbol{\varphi}=0$ を最後に取るのだから，直線の足が残っている図は消えて，それらは必ず外場で吸収するか，$\boldsymbol{\Delta}$ でつながなければならない．たとえば2個の外場と，2個の3点ヴァー

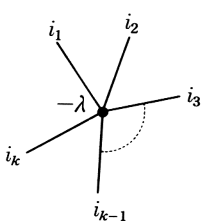


図2-1 k 点ヴァーテックス．$i_1, i_2, \cdots, i_k$ は，$\boldsymbol{\varphi}$ の種類とともに，時間の足も含む．

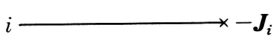


図2-2 外場のグラフ．

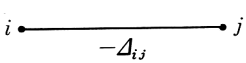
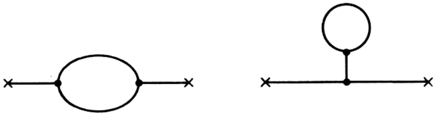
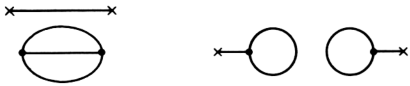


図2-3 伝搬関数．

* 厳密には，$T\to\infty$，$t\to it$ とした(2.37)型のものをこうよぶ．



(a)



(b)

図 2-4 2個の外場と，2個の3点ヴァーテックスより作られる4種の Feynman ダイヤグラム．(a) 連結したグラフ，(b) 非連結なグラフ．

テックスから作られる Feynman ダイヤグラムは図 2-4 のようである．こうした，(2.81)に基づく展開を正準量子化法では **Wick 展開**とよぶ．

さて，図 2-4 の(b)のグラフは，それぞれ2つの独立な部分から成り立つ非連結なグラフである．これらは，(b)をみればわかるように，より低次(外場あるいはヴァーテックスに関して)のグラフの積で与えられる．こうした部分の寄与は，

$$W(\boldsymbol{J}) = -\ln \tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) \tag{2.83}$$

という $W(\boldsymbol{J})$ を導入することにより，効かないように処理することができ，連結成分(a)だけが取り出せる．実際に W の微分を実行してみることでこのことは理解できる．(具体的には 4-1 節の(4.20)を見ることで感じはつかめるであろう.) W を，連結した Green 関数の生成母関数とよぶ．

こうして摂動論の一般論ができた．最後に摂動論の中での演算子順序の問題を考えてみよう．差分化した伝搬関数と外場微分を用いるかぎりは，1-2 節で議論したように α-順序での答えは α に依存しない．つまり，どの演算子順序でも同等である．しかし，表式上の点やその他の技術的な煩雑さを除去する点で，連続表示の経路積分(1.52)は便利である．摂動論では，(2.73)のナイーヴな極限をとり，

$$\tilde{Z}_T[\boldsymbol{J}] = \int DpDq \exp \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{\hbar}(ip\dot{q} - H_0(p,q) - gH_I(p,q) - pK - qJ) \right] \Bigg|_{\text{periodic}}$$

$$= \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} dt\, g H_\mathrm{I}\left(-\hbar\frac{\delta}{\delta K(t)},\ -\hbar\frac{\delta}{\delta J(t)}\right)\right]\tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}] \tag{2.84}$$

とおくことが出発点となる．ここで，(2.2)と(2.3)より，

$$\tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}] \equiv \int Dq \exp\left[\frac{-1}{\hbar}\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} dt\left\{\frac{m}{2}(\dot{q}+iK)^2+\frac{m\omega^2}{2}q^2+qJ\right\}\right]\Bigg|_{\mathrm{periodic}} \tag{2.85}$$

であり，“periodic”は

$$q(t_\mathrm{f}) = q(t_\mathrm{i}) \tag{2.86}$$

を意味する．(1.52)で約束したように，積分測度を定義しなくてはいけない．そのためには，周期固有関数(2.11)を用いることで，

$$q(t) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} q_r G_r(t) \tag{2.87}$$

と展開し，

$$Dq \equiv N_\infty \prod_{r=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\, dq_r \tag{2.88}$$

と考える．N_∞ はこうして計算したとき，不可避的に現われる無限大を吸収する定数である．つまり，(2.88)は積分測度の定義になっているわけではない．ここに連続表示の欠点がある．しかし，差分と比べて微分操作が扱いやすい点で，連続表示はだんぜん便利である．連続表示では，$\tilde{Z}$ は外場の汎関数であり，$(\boldsymbol{J})$ の代わりに $[\boldsymbol{J}]$ という記号を用いると，微分も汎関数微分

$$\frac{\delta F[K(t)]}{\delta K(t_0)} \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\frac{F[K(t)+\epsilon\delta(t-t_0)]-F[K(t)]}{\epsilon} \tag{2.89}$$

で書くことになる．

さて，2-1 節での議論をもう一度たどると，

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_T[\boldsymbol{J}] &= \tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}=0]\exp\left[-\frac{S_\mathrm{E}{}^{J}[q^\mathrm{c}]}{\hbar}\right]\\ \tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}=0] &\equiv \int Dq\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}} dt\left(\frac{m}{2}\dot{q}^2+\frac{m}{2}\omega^2 q^2\right)\right]\end{aligned} \tag{2.90}$$

となり，$S_E{}^J[q^c]$ は(2.18)で与えたものと同じであるが，連続表示を強調するため $[q^c]$ とした．さて，$\tilde{Z}_T[\boldsymbol{J}=0]$ を計算してみよう．(2.87)を用いて指数の肩を書き直し，(2.13)に注意すると

$$\tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}=0] = N_\infty \prod_{r=-\infty}^{\infty} \int \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} dq_r \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\sum_{r=-\infty}^{\infty}\left\{\left(\frac{2\pi r}{T}\right)^2+\omega^2\right\}q_r{}^2\right]$$

が得られ，Gauss 積分の公式を順次利用してやれば

$$\tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}=0] = N_\infty \prod_{r=-\infty}^{\infty}\left[\left(\frac{2\pi r}{T}\right)^2+\omega^2\right]^{-1/2} \tag{2.91}$$

となる．ここで，公式

$$\prod_{r=1}^{\infty}\left(1+\frac{a^2}{r^2}\right) = \frac{\sinh \pi a}{\pi a} \tag{2.92}$$

に注意しながら，

$$N_\infty \equiv \frac{1}{T}\prod_{r=1}^{\infty}\left(\frac{2\pi r}{T}\right)^2 \tag{2.93}$$

ととると，正しい答え $\tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}=0]=1/2\sinh(\omega T/2)$((2.22)式)が出ることがわかる．したがって連続表示でも N_∞ を除けば正しい答えを出すことができた．

こうした連続表示では，演算子順序の問題は抜け落ちてしまうようにみえる．というのも，(1.39)のように α-順序を特徴付けるのは，差分化した足の混ざり具合であったからである．実際どうなのか調べてみよう．

$$H_I(p,q) = pq \tag{2.94}$$

で与えられるとき，(2.84)に代入して最後に $\boldsymbol{J}=0$ とおく過程での g の1次の項は，

$$\begin{aligned}\sim -\frac{1}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\,\hbar^2 \frac{\delta^2}{\delta J(t)\delta K(t)} \exp\Big[-i\iint_{t_i}^{t_f} dt_1 dt_2 J(t_1)\dot{\Delta}(t_1-t_2)K(t_2)+O(J^2)\\ +O(K^2)\Big]\Big|_{\boldsymbol{J}=0} = i\hbar T\dot{\Delta}(0) = 0\end{aligned} \tag{2.95}$$

となる．1行目は，(2.18)の $S_E{}^J[q^c]$ での，J と K による部分をとり出し，部分積分を1回行なったものである．

同じ問題を，きちんと演算子順序を考慮する差分化した表示で考えてみよう．

$$H_{\mathrm{I}}(P,Q) \equiv \left(\frac{1}{2}+\alpha\right)PQ+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)QP \tag{2.96}$$

として，(1.28)に代入すると，

$$H_{\mathrm{I}}{}^{[\alpha]}(p,q) = pq \tag{2.97}$$

となる．(2.74)に代入すれば

$$\tilde{Z}_T(\boldsymbol{J}) = \lim_{N\to\infty} \exp\left[-\frac{\Delta t}{\hbar}g\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{(\Delta t)^2}\frac{\partial^2}{\partial K_j \partial J_j{}^{(\alpha)}}\right]\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J}) \tag{2.98}$$

となる．($J_j{}^{(\alpha)}$ 微分は，(2.75)で与えられている．) 上と同様に g の1次の項を計算する．

$$\sim -\frac{\hbar}{\Delta t}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial K_j \partial J_j{}^{(\alpha)}}\exp\left[-i(\Delta t)\sum_{k,k'}J_k \Delta_{kk'}(\Delta K_{k'+1})+O(J^2)+O(K^2)\right]\Bigg|_{\boldsymbol{J}=0}$$
$$= i\hbar\sum_{j=1}^{N}\left[\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)(\Delta_{j,j-1}-\Delta_{jj})+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)(\Delta_{j-1,j-1}-\Delta_{j-1,j})\right]$$

(2.24)より

$$\begin{aligned}\Delta_{jj} = \Delta_{j-1,j-1} &= \frac{-\cosh\dfrac{\omega T}{2}}{2\omega\sinh\dfrac{\omega T}{2}} \\ \Delta_{j,j-1} = \Delta_{j-1,j} &= \frac{-\cosh\dfrac{\omega T}{2}}{2\omega\sinh\dfrac{\omega T}{2}}-\frac{\Delta t}{2}\end{aligned} \tag{2.99}$$

であるから，結局 g の1次の項は，

$$-\frac{\hbar}{\Delta t}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial K_j \partial J_j{}^{(\alpha)}}\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J})\Bigg|_{\boldsymbol{J}=0} = i\hbar\alpha T\tilde{Z}_T{}^{(0)}(\boldsymbol{J}=0) \tag{2.100}$$

となる．したがって，$\alpha=0$ の **Weyl** 順序をとると，連続表示の結果(2.95)を再現できることになる．つまり，連続の表式(2.84)は，(摂動論の意味においては)Weyl の演算子順序をもっているわけである．

前にも述べたが，連続表示でも，調和振動子の場合は無限大因子 N_∞ を除け

ば，答えは正しいということであった．(2.91)の $\tilde{Z}_T^{(0)}[\boldsymbol{J}=0]$ には N_∞ が含まれていたが，同じものが(2.90)の $\tilde{Z}_T[\boldsymbol{J}]$ にもあるので

$$\tilde{Z}_T{}^{\mathrm{R}}[\boldsymbol{J}] \equiv \frac{\tilde{Z}_T[\boldsymbol{J}]}{\tilde{Z}_T{}^{(0)}[\boldsymbol{J}=0]} \tag{2.101}$$

という量を考えれば連続表示で計算しても，外場依存性に関しては差分化してきちんと計算したものと一致するということになる．

以後，連続表示を用いるときは，(2.101)を念頭におくことにしよう．

2-3 WKB 法

前節でハミルトニアンの一部が小さいときの摂動的手法を紹介したが，ここでは経路積分法がその特徴をいかんなく発揮する **WKB**(Wentzel-Kramers-Brillouin)法について議論する．

簡単のため，積分

$$I(g) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi g}} e^{-S(x)/g} \tag{2.102}$$

を考えよう．$g \ll 1$ とすると，積分にきくのは $S(x)$ の値が小さいところである．そのためには，点 x_0 が，

$$\left.\frac{dS}{dx}\right|_{x=x_0} = 0, \qquad \left.\frac{d^2S}{dx^2}\right|_{x=x_0} > 0 \tag{2.103}$$

をみたせばよい．点 x_0 があったら，$S(x)$ を x_0 のまわりで Taylor 展開して，

$$S(x) = S(x_0) + \frac{1}{2}S^{(2)}(x_0)(x-x_0)^2 + \frac{1}{3!}S^{(3)}(x_0)(x-x_0)^3 + \cdots$$

(2.102)へ代入する．

$$\begin{aligned} I(g) &\cong e^{-S(x_0)/g}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi g}}\exp\left\{-\frac{1}{2g}S^{(2)}(x_0)x^2 - \frac{1}{3!g}S^{(3)}(x_0)x^3 - \frac{1}{4!g}S^{(4)}(x_0)x^4 - \cdots\right\} \\ &= e^{-S(x_0)/g}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\exp\left\{-\frac{1}{2}S^{(2)}(x_0)x^2 - \frac{\sqrt{g}}{3!}S^{(3)}(x_0)x^3 - \frac{g}{4!}S^{(4)}(x_0)x^4 - \cdots\right\} \end{aligned}$$

ここで，1行目では $x-x_0$ を x と書き，2行目では $x\to\sqrt{g}x$ とスケールした．g が小さいことから指数の肩を g で展開して（$S^{(n)}(x_0)\equiv S_0{}^{(n)}$ と書く），

$$I(g)\cong e^{-S(x_0)/g}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}e^{-S_0{}^{(2)}x^2/2}\left(1-\frac{g}{4!}S_0{}^{(4)}x^4+\frac{g}{2}\left(\frac{S_0{}^{(3)}}{3!}\right)^2x^6+O(g^2)\right)$$

を得る．(1.76)の Gauss 積分公式の両辺を a で微分して得られる公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}e^{-ax^2/2}\,(x^2)^n=\{(2n-1)(2n-3)\cdots3\cdot1\}a^{-(2n+1)/2} \tag{2.104}$$

を用いると，

$$I(g)\cong e^{-S_0/g}\frac{1}{\sqrt{S_0{}^{(2)}}}(1+O(g))$$

$$O(g)\equiv\frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\left(-\frac{g}{4!}S_0{}^{(4)}x^4+\frac{g}{2}\left(\frac{S_0{}^{(3)}}{3!}\right)^2x^6+\cdots\right)e^{-S_0{}^{(2)}x^2/2}}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}e^{-S_0{}^{(2)}x^2/2}} \tag{2.105}$$

$$=-\frac{g}{8}\frac{S_0{}^{(4)}}{(S_0{}^{(2)})^2}+\frac{5g}{24}\frac{(S_0{}^{(3)})^2}{(S_0{}^{(2)})^3}+O(g^2)$$

と計算される．いま，g が小さいとして計算したわけで，前節の摂動論とどう違うのか，という疑問もわくかもしれないが，指数の肩が S_0/g であることは単純な摂動とは異なることを示唆している．

もう少し，具体的にこのことをみてみよう．積分

$$I(g^2)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2-g^2x^4/8}$$
$$\left(=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi g}}e^{-(1/g)(x^2/2+gx^4/8)}\right) \tag{2.106}$$

を考えよう．((2.102)と合わせるためには(　)内のように変数をシフトすればよい.) これは，このまま上記の方法を用いても，$x_0=0$ が最小値を与える点となって，(2.105)の答えは，直接(2.106)で摂動展開をして計算した表式

$$I(g^2) \cong \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}\left(1-\frac{g^2}{8}x^4+\frac{g^4}{128}x^8+\cdots\right)$$

$$= 1-\frac{3}{8}g^2+\frac{105}{128}g^4+O(g^6) \tag{2.107}$$

と一致する．ところで，(2.106)に Gauss の積分公式

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-(y+igx^2/2)^2/2} \tag{2.108}$$

を挿入してみよう．指数の肩は

$$-\frac{x^2}{2}-\frac{g^2}{8}x^4-\frac{1}{2}\left(y+\frac{i}{2}gx^2\right)^2 = -\frac{x^2}{2}-\frac{igy}{2}x^2-\frac{y^2}{2}$$

となる．実は平方完成された(2.108)のシフト分 $igx^2/2$ は，挿入したとき，x^4 項を打ち消すように決めたのである．こうして，

$$I(g^2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dxdy}{2\pi} e^{-(1+igy)x^2/2-y^2/2}$$

となる．x に関する積分を行なって

$$I(g^2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{1+igy}} e^{-y^2/2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2-\ln(1+igy)/2} \tag{2.109}$$

と変形する．このままのかたちで，g について展開すれば，もちろん(2.107)と一致する．そこで，(2.109)で

$$S(y) \equiv \frac{y^2}{2}+\frac{1}{2}\ln(1+igy)$$

として，前の議論を展開する．

$$S'(y_0) = y_0+\frac{ig}{2(1+igy_0)} = 0$$

これより

$$igy_0 = \frac{-1\pm\sqrt{1+2g^2}}{2}$$

と求まるが，下側の符号は $1+igy_0=(1-\sqrt{1+2g^2})/2$ となり，log の中身が負

になるとともに $g\to 0$ で 0 となり，発散してしまうので捨てなければならない．したがって

$$igy_0=\frac{-1+\sqrt{1+2g^2}}{2}$$

このとき

$$S(y_0)=-\frac{1}{8g^2}(\sqrt{1+2g^2}-1)^2+\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+\sqrt{1+2g^2}}{2}\right)$$

$$S^{(2)}(y_0)=\frac{2\sqrt{1+2g^2}}{1+\sqrt{1+2g^2}}>0,\qquad S^{(3)}(y_0)=-\frac{8ig^3}{(1+\sqrt{1+2g^2})^3}$$

$$S^{(4)}(y_0)=-\frac{48g^4}{(1+\sqrt{1+2g^2})^4},\qquad S^{(n)}(y_0)=O(g^n)$$

であるから，$g\ll 1$ であれば，$S^{(3)}(y_0)$ から先を展開して，

$$I(g^2)\cong\exp\left[\frac{(1-\sqrt{1+2g^2})^2}{8g^2}-\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+\sqrt{1+2g^2}}{2}\right)\right]\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}e^{-S_0{}^{(2)}x^2/2}$$
$$\times\left[1+\frac{48g^4}{(1+\sqrt{1+2g^2})^4}\frac{x^4}{4!}+O(x^6)\right]$$

とし，($y-y_0\to x$ とおいた)(2.105)を計算したようにGauss積分の公式(2.104)を用いれば，最終的に

$$I(g^2)\cong e^{(\sqrt{1+2g^2}-1)^2/8g^2}\frac{1}{(1+2g^2)^{1/4}}\left[1+\frac{3}{2}\frac{g^4}{(1+2g^2)(1+\sqrt{1+2g^2})^2}+\cdots\right] \tag{2.110}$$

が得られる．注目すべきことは，(2.107)では被積分関数の g の展開は g^2 ではじまっていたのが，今度の場合は g^4 からになったことである．g^2 までの効果は，$e^{-S_0}(S_0{}^{(2)})^{-1/2}$ のなかにとり入れたことになったのである．つまり，(2.109)の積分から出発したとき，g で摂動展開をする場合と，古典解のまわりで展開する場合，両者とも g が小さい仮定のもとで有効である点にかわりはないが，後者は明らかに摂動級数のある種のたしあげが行なわれている．古典解のまわりでの展開は，g に対する級数展開ではあっても非摂動効果が一部入

っている*.

さて，経路積分(の Feynman 公式)((1.77)を連続表示にしたもの)

$$\tilde{K}[\boldsymbol{J}] \equiv \int Dq \exp\left[-\frac{S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}[q]}{\hbar}\right]\Bigg|_{q(t_{\mathrm{f}})=q_{\mathrm{f}},\, q(t_{\mathrm{i}})=q_{\mathrm{i}}}$$
$$S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}[q] \equiv \int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}} dt \left[\frac{m}{2}(\dot{q}+iK)^2+V(q)+qJ\right] \tag{2.111}$$

で上述のプログラムを実行してみよう．(2-1 節でやった調和振動子の計算は，実は WKB 法が厳密である 1 つの例であった.) 連続表示で議論する．g に相当するのは，Planck 定数 $\hbar$ である．条件(2.103)は

$$\frac{\delta S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}[q]}{\delta q(t)}\bigg|_{q^{\mathrm{c}}} = -m\ddot{q}^{\mathrm{c}}+V'(q^{\mathrm{c}})+J-im\dot{K} = 0$$

$$V'(q) \equiv \frac{\partial V}{\partial q}, \qquad q^{\mathrm{c}}(t_{\mathrm{f}}) = q_{\mathrm{f}}, \qquad q^{\mathrm{c}}(t_{\mathrm{i}}) = q_{\mathrm{i}}$$

という古典的な Euler-Lagrange 方程式と，**安定条件**(stability condition)

$$\int dt' \frac{\delta^2 S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta q(t)\delta q(t')}\bigg|_{q^{\mathrm{c}}} u_n(t') = \left[-m\frac{d^2}{dt^2}+V''(q^{\mathrm{c}})\right]u_n(t) = \Omega_n{}^2 u_n(t)$$
$$\Omega_n{}^2 > 0 \qquad (n=0,1,2,\cdots) \tag{2.112}$$

ただし $u_n(t_{\mathrm{f}})=u_n(t_{\mathrm{i}})=0$ となる．(実は多くの場合，安定条件には零固有値 $\Omega_0{}^2=0$ が含まれる．この事情は，次節で議論する.) (2.111)は(2.105)のように，$q-q^{\mathrm{c}}\to q$ と書いて

$$\tilde{K}[\boldsymbol{J}] = \exp\left[-\frac{S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}[q^{\mathrm{c}}]}{\hbar}\right]\int D\boldsymbol{q} \exp\left[-\frac{1}{2\hbar}\boldsymbol{q}^2\boldsymbol{\cdot}\frac{\delta^2 S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right.$$
$$\left.-\frac{1}{3!\hbar}\boldsymbol{q}^3\boldsymbol{\cdot}\frac{\delta^3 S_{\mathrm{E}}{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^3}-\cdots\right]\Bigg|_{q(t_{\mathrm{f}})=q(t_{\mathrm{i}})=0}$$

と展開される．ここで

---

* この理由のため，場の理論での応用には特に興味がある．それについては 4-2 節補助場の方法で議論する．

$$\boldsymbol{q}^n \cdot \frac{\delta^n S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^n} \equiv \int_{t_i}^{t_f} dt_1 \cdots dt_n q(t_1) \cdots q(t_n) \frac{\delta^n S_E{}^{\boldsymbol{J}}[q]}{\delta q(t_1) \cdots \delta q(t_n)} \bigg|_{q^c} \tag{2.113}$$

の記号を用いた．積分測度は，(2.112)の固有関数 $u_n(t)$ を用いて，

$$q(t) = \sqrt{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} q_n u_n(t) \tag{2.114}$$

と展開し（つまり $q(t) = q^c(t) + \sqrt{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} q_n u_n(t)$ と書いたことになる），

$$D\boldsymbol{q} \equiv \prod_{n=0}^{\infty} \frac{dq_n}{\sqrt{2\pi}}$$

と定義する．（もちろん，これは定義されていないが，実際は，(2.101)の意味で規格化して使う．以下ではこうした理解のもと，話を進める.）こうすると，Gauss 積分を

$$\begin{aligned} \int D\boldsymbol{q} \exp\left\{-\frac{1}{2} \boldsymbol{q}^2 \cdot \frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{\infty} \frac{dq_n}{\sqrt{2\pi}} e^{-\Omega_n{}^2 q_n{}^2/2} \\ &= \left[\prod_{n=0}^{\infty} \Omega_n{}^2\right]^{-1/2} \equiv \left[\det\left(\frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right)\right]^{-1/2} \end{aligned} \tag{2.115}$$

のように書いて，

$$\tilde{K}[\boldsymbol{J}] \cong e^{-S_E{}^{\boldsymbol{J}}[q^c]/\hbar} \left[\det\left(\frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right)\right]^{-1/2} K[\boldsymbol{J}]$$

$$\begin{aligned} K[\boldsymbol{J}] &\equiv \frac{1}{\left[\det\left(\frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right)\right]^{-1/2}} \int D\boldsymbol{q} \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} \boldsymbol{q}^2 \cdot \frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2} - \frac{1}{\hbar} \sum_{n \geqq 3} \frac{1}{n!} V^{(n)}(q^c) \cdot q^n\right\} \\ &\underset{q \to \sqrt{\hbar} q}{=} \frac{1}{\left[\det\left(\frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right)\right]^{-1/2}} \int D\boldsymbol{q} \exp\left\{-\frac{1}{2} \boldsymbol{q}^2 \cdot \frac{\delta^2 S_E{}^{\boldsymbol{J}}}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right\} \left(1 - \frac{\hbar}{4!} V^{(4)}(q^c) \cdot q^4\right. \\ &\qquad \left. + \frac{\hbar}{2}\left(\frac{V^{(3)}(q^c)}{3!} \cdot q^3\right)^2 + O(\hbar^2)\right) = 1 + O(\hbar) \end{aligned} \tag{2.116}$$

が得られる．ここで，(2.111)での作用に関する3回以上の微分は，ポテンシャル $V(q)$ のそれに等しいこと，

$$q^n \cdot V^{(n)}(q^c) \equiv \int_{t_i}^{t_f} dt q(t)^n V^{(n)}(q^c(t))$$

を用いた．(2.116)の $O(\hbar)$ の部分は(2.101)の意味で規格化されている．(2.115)の最後の表式の行列式を **Van Vleck 行列式**という．実は，Van Vleck 行列式(2.115)は，古典解 q^c と古典作用の値 $S_E{}^J[q^c]$ より(2.36)のように

$$\left[\det\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right)\right]^{-1} = -2\pi\hbar\frac{\partial^2 S_E{}^J[q^c]}{\partial q_f \partial q_i} \tag{2.117}$$

と求めることができる*．($S_E{}^J[q^c]$ は，境界条件を通して，q_f と q_i の関数である．)

(2.116)を(2.105)の最終表式のように計算するのは，単一積分ではないので，(2.105)ほど単純でないが，前節の摂動論で学んだ Feynman ダイヤグラムの手法を用いればよい．そのために，$K[\boldsymbol{J}]$ を

$$K[\boldsymbol{J}] = \frac{1}{\left[\det\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta \boldsymbol{q}^2}\right)\right]^{-1/2}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\sum_{n\geqq 3}\frac{\hbar^{n/2}}{n!}V^{(n)}(q^c)\cdot\left(\frac{\delta}{\delta j}\right)^n\right]$$
$$\times\int D\boldsymbol{q}\exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}^2\cdot\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}+q\cdot j\right]\bigg|_{j=0}$$

と書く．指数の肩を平方完成してみると，

$$-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}^2\cdot\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta \boldsymbol{q}^2}+q\cdot j = -\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{q}-j\cdot\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}\right)^{-1}\right]^2\cdot\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{j}^2\cdot\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}\right)^{-1}$$

となるので**，$\boldsymbol{q}$ 積分を行ない

$$\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}\right)^{-1} \equiv \boldsymbol{\Delta}$$

を伝搬関数とみなすと，

$$K[\boldsymbol{J}] = \exp\left[-\sum_{n\geqq 3}\frac{\hbar^{n/2-1}}{n!}V^{(n)}(q^c)\cdot\left(\frac{\delta}{\delta j}\right)^n\right]\exp\left[\frac{1}{2}j\cdot\boldsymbol{\Delta}\cdot j\right]\bigg|_{j=0} \tag{2.118}$$

---

* 証明は，こうおいた Feynman 核が(Euclid 化された) Schrödinger 方程式をみたすことよりわかる．詳しくは，崎田文二，吉川圭二：径路積分による多自由度の量子力学(岩波書店，1986)の 79 ページを参照せよ．

** 簡略記号の関係は

$$\boldsymbol{j}^2\cdot\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}\right)^{-1} = j\cdot\left(\frac{\delta^2 S_E{}^J}{\delta\boldsymbol{q}^2}\right)^{-1}\cdot j$$

などを表わす．

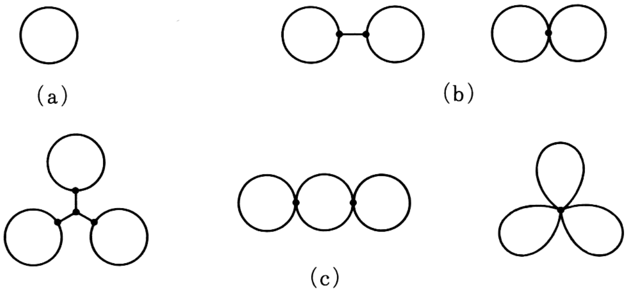


図 2-5 (a) 1ループグラフ．(b) 2ループグラフ．左側は2つの $V^{(3)}$ ヴァーテックスにより，右側は1つの $V^{(4)}$ ヴァーテックスにより作られている．(c) 3ループグラフ．4つの $V^{(3)}$ ヴァーテックス，2つの $V^{(4)}$ ヴァーテックス，1つの $V^{(6)}$ ヴァーテックス，その他いろいろある．

となる．つまり，$\boldsymbol{\Delta}$ を((2.112)より)

$$\left[-m\frac{d^2}{dt^2}+V''(q^c)\right]\boldsymbol{\Delta}(t-t') = \delta(t-t') \qquad (2.119)$$

の解とすると，ヴァーテックス $-(\hbar)^{n/2-1}V^{(n)}(q^c)$ に対して伝搬関数ですべてその足をつぶしたグラフだけが生き残ることになる．実際，(2.116)の最後の表式で，$\hbar$ の1次のグラフは図2-5(b)のように2個の**閉じた内線**(ループという)で特徴付けられる．$\hbar$ の2次の項も，図2-5(c)のように3個のループを含むグラフより成り立っている．この意味で $\hbar$ の0次の$[\det(\delta^2 S_E{}^J/\delta \boldsymbol{q}^2)]^{-1/2}$ は，1個のループよりできている．つまり，$\hbar$ の n 次の項を計算するには，可能な(必ずしもつながっているとはかぎらない)$(n+1)$個のループを含むダイヤグラムを，すべて書きだせばよいことになる．こうした意味で，$\hbar$ の展開は，Feynman ダイヤグラムでのループの個数による展開であるということもできる(**ループ展開**(loop expansion)とよばれる)．

こうして，原理的には $\hbar$ の任意の次数まで(2.116)を計算できることはわかったが，$\hbar$ は実際はゼロでなく，

$$\hbar \sim 10^{-34}\ \text{Joule}\cdot\text{sec}$$

である．したがって，上述の展開がよい近似で成立するのは，この値にくらべて $S_E{}^J[q^c]$ の値が十分大きいとき，すなわち $S_E{}^J[q^c]$ がほとんど古典的パラメ

ータで記述できるときである．(2.116)の展開は，こうした意味で準古典的近似，もしくは **WKB 近似**とよばれる．

経路積分における WKB 近似は，こうした古典的な Euler-Lagrange 方程式の解のまわりでの展開である．この意味で，量子力学における古典解の役割の重要性は，経路積分法の下で，非常によくみえてくる．

2-4 インスタントンとトンネル効果

この節では，Euclid 化の方法と WKB 法がその能力をいかんなく発揮する例について議論する．1-3 節の終わりで議論した分配関数，

$$\tilde{Z}_T(0) \equiv z(T) = \mathrm{Tr}\, e^{-TH/\hbar} \tag{2.120}$$

が，$T \to \infty$ で基底状態のエネルギー E_0 を

$$\lim_{T\to\infty} z(T) \cong e^{-TE_0/\hbar} \tag{2.121}$$

の意味で与えることは，(1.71)，あるいは具体例(2.39)と(2.41)をみればわかる．この事実と，前節の WKB 近似を用いて，次のようなポテンシャル

$$V(q) \equiv \frac{m\omega^2}{8a^2}(q^2-a^2)^2 \qquad (a>0) \tag{2.122}$$

で与えられる力学系を考察しよう．図 2-6 のかたちをみると，エネルギーが小さいときの古典的運動は，2 つの対称点のどちらかのまわりでの微小振動(調和振動子)であることは容易に理解できるだろう．しかし，量子力学に移るとどうなるか？　よく知られているように，トンネル効果のために，いかに運動

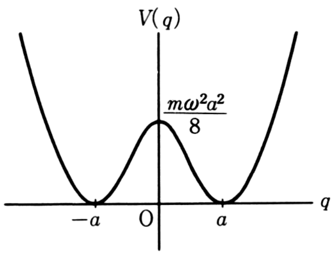


図 2-6 ω の値が大きくなればなるほど，2 つの 2 次曲線の重なりでよく近似できるようになる．

エネルギーがポテンシャルの山の高さより小さくても，2つの最小点——古典的真空(＝エネルギーゼロの点)——の混ざりがおこり

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathrm{R.V.}\rangle \pm |\mathrm{L.V.}\rangle)$$

なる2つの状態ができる．ここに $|\mathrm{R.V.}\rangle$ と $|\mathrm{L.V.}\rangle$ はそれぞれ右側，左側の基底状態である．全体の基底状態は，もちろん節のない対称状態である．これから，そのエネルギーを計算していこう．

(2.120)の経路積分表示は，((1.76)の連続表示で $J=0$ として)

$$z(T) = \int Dq \exp\left(-\frac{S_{\mathrm{E}}[q]}{\hbar}\right)\Bigg|_{q(T/2)=q(-T/2)}$$
$$S_{\mathrm{E}}[q] \equiv \int_{-T/2}^{T/2} dt\left[\frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q)\right] \tag{2.123}$$

で与えられる．

古典的運動方程式

$$-m\ddot{q}^{\mathrm{c}} - \frac{m\omega^2}{2}q^{\mathrm{c}} + \frac{m\omega^2}{2a^2}(q^{\mathrm{c}})^3 = 0 \tag{2.124}$$

の1つの(自明な)解は，

$$q^{\mathrm{c}} = \pm a, \qquad S_{\mathrm{E}}[q^{\mathrm{c}}] = 0 \tag{2.125}$$

である．安定条件(2.112)はいま

$$\left(-m\frac{d^2}{dt^2} + m\omega^2\right)u_n(t) = \Omega_n{}^2 u_n(t) \tag{2.126}$$

となり，$u_n(t)$ として(2.10)の $G_r(t)$ を($r \to n$ として)採れば，

$$\Omega_n{}^2 = m\left\{\left(\frac{2\pi n}{T}\right)^2 + \omega^2\right\} > 0 \qquad (n=0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{2.127}$$

のようにみたされている．(図2-6をみれば，$\pm a$ は最小点でありこのまわりで下に凸であるから明らか．) ポテンシャル(2.22)は偶関数で，WKB近似(2.116)を思い出すと2つの解(2.125)は同じ寄与をする．これを z_0 と書く．さらに(2.116)で $V^{(3)}$ 以上を無視すると，結果は，調和振動子((2.22)で $J\to$

0 としたもの)の場合と同じである.

$$
\begin{aligned}
z_0 &= \langle a|e^{-TH/\hbar}|a\rangle = \langle -a|e^{-TH/\hbar}|-a\rangle \\
&= \left[\det\left(-m\frac{d^2}{dt^2}+m\omega^2\right)\right]^{-1/2} = \frac{1}{2\sinh\dfrac{\omega T}{2}}
\end{aligned}
\qquad (2.128)
$$

これからは Feynman 核のような書き方 $\langle \pm a|e^{-TH/\hbar}|\pm a\rangle$ を採用するが，その意味するところは，$\pm a$ と $\pm a$ を結ぶ古典解のまわりでの WKB 近似を行なうということである．Euclid 化の方法により，$T\to\infty$ で，(2.128)よりたしかに調和振動子の基底状態のエネルギー

$$
E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad (2.42)
$$

が求まる．

トンネル効果はどうしたのか．実は，運動方程式(2.124)には次のような別の解

$$
q^{\mathrm{c}}(t) = \pm a\tanh\frac{\omega(t-t_0)}{2} \qquad (2.129)
$$

が存在する．図 2-7 をみると，t_0 は解の中心を表わすパラメータであることがわかる*．(+)符号解を**キンク**(kink)解，(−)符号解を**反キンク**(anti-kink)解とよぶ．これらは周期条件をみたさないが，図 2-8 から容易に想像できるように，ω が大きいとき，双方の“積”

$$
\tilde{q}^{\mathrm{c}}(t) = \pm a\tanh\frac{\omega(t-t_0)}{2}\tanh\frac{\omega(t-\bar{t}_0)}{2} \qquad (t_0\gg\bar{t}_0) \qquad (2.130)
$$

は，運動方程式を次式

$$
m\ddot{\tilde{q}}^{\mathrm{c}}+\frac{m\omega^2}{2}\tilde{q}^{\mathrm{c}}-\frac{m\omega^2}{2a^2}(\tilde{q}^{\mathrm{c}})^3 = O(e^{-\omega(t_0-\bar{t}_0)}) \qquad (2.131)
$$

の意味でみたし，周期条件も満足する．(2.130)で t_0 ($\bar{t}_0$)はキンク(反キンク)

---

* t_0 の起源は，作用 S_{E} (2.123)が時間パラメータ t を $t+t_0$ としても不変であることである．(われわれの場合は $T\to\infty$ としてはじめて理解される.) t_0 を重心(中心)座標とよぶ.

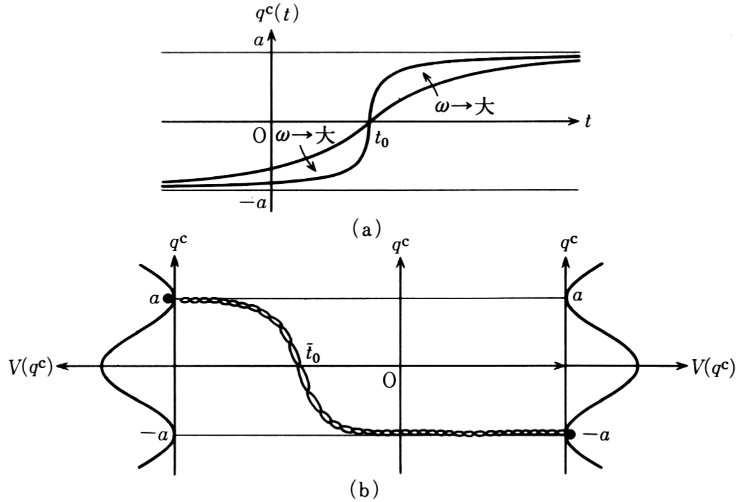


図 2-7 キンク解と反キンク解．(**a**) キンク解．ω が大きくなると階段関数に近くなる．(**b**) 反キンク解と断面図．輪ゴムの鎖をポテンシャルの谷から谷へ，$q(-T/2)=a$，$q(T/2)=-a$ として渡したとみる．山頂の $t=\bar{t}_0$ のまわりでゴムがのびて，エネルギーがたまっていることがわかる．

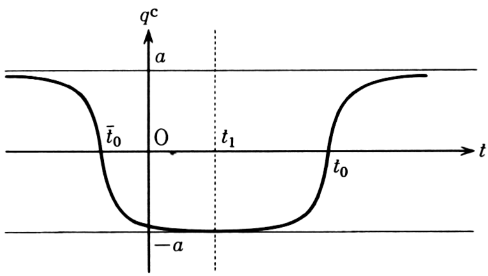


図 2-8 キンク解と反キンク解の合成．時刻 $t=t_1$ で領域を 2 つに分ける．

の中心座標である．(2.129)，(2.130)などのように(Euclid)時間に依存する解を**インスタントン**とよぶ．その理由は，図 2-7(b)からも直観的に理解できるように，ある時刻 $t_0, \bar{t}_0$ の近傍だけにエネルギーがかたまっており，ほとんど**瞬間的**に状態 a から $-a$ への遷移を担う**粒子**のようにみえるからである．このことから，インスタントンがトンネル効果の担い手であることも理解できよ

う．キンク，反キンク解を以後，インスタントン，反インスタントン解とよぶことにする．

(2.131)より，**WKB** 近似の下ではインスタントンと反インスタントン解の重なりは，中心さえ異なっていれば，ほとんどなく，それぞれ独立に経路積分の古典軌道に寄与すると考えてよい．こうした考え方を，**希ガス近似**とよぶ．

インスタントンの寄与は，インスタントンなしの寄与(2.127)で規格化して，

$$K \equiv \frac{z_1}{z_0} \equiv \frac{\langle a|e^{-TH/\hbar}|-a\rangle_1}{\langle a|e^{-TH/\hbar}|a\rangle_0}$$

で与えられる．添字は考慮するインスタントン数を表わす．

WKB 近似では，(2.116)とわれわれのポテンシャルのかたち(2.122)から明らかなように，K は q^c に関して偶関数であるから反インスタントンの寄与もまったく同じで，

$$z_1 = \langle a|e^{-TH/\hbar}|-a\rangle_1 = \langle -a|e^{-TH/\hbar}|a\rangle_1 \tag{2.132}$$

となる．(規格化のおかげで，波動関数の寄与((2.41)をみよ)はたがいに打ち消しあう．) K の計算は少々面倒なので後で行なうことにして，希ガス近似で分配関数の K 依存性をみよう．

最初に考慮すべき過程は，インスタントンと反インスタントンが図 2-8 のように寄与する場合である．図のように時刻 $t=t_1$ で領域を分けると，分配関数(これを z_2 と書く)は，$T\to\infty$ として，

$$\begin{aligned} z_2 &= \langle a|e^{-TH/\hbar}|a\rangle_2 (= \langle -a|e^{-TH/\hbar}|-a\rangle_2) \\ &\underset{T\to\infty}{\cong} \langle a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|-a\rangle_1 \langle -a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|a\rangle_1 \end{aligned} \tag{2.133}$$

と書くことができる．一方，z_0 のほうも，$T\to\infty$ の下で(2.127)は，

$$z_0 \underset{T\to\infty}{\cong} \begin{cases} \langle -a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|-a\rangle_0 \langle -a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|-a\rangle_0 \\ \langle a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|a\rangle_0 \langle a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|a\rangle_0 \end{cases} \tag{2.134}$$

と書くことができ，インスタントンの寄与 z_1 も，

$$z_1 \cong \begin{cases} \langle a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|-a\rangle_1 \langle -a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|-a\rangle_0 \\ \langle -a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|-a\rangle_0 \langle -a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|a\rangle_1 \end{cases} \tag{2.135}$$

などと書ける．これらを用いることで，(2.133)は次のように変形できる．まずz_0を分母，分子にかけて，(2.134)の上側の式に注意すると

$$z_2 \underset{T\to\infty}{\cong} \langle a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|-a\rangle_1\langle -a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|a\rangle_1 \times\frac{\langle -a|e^{-(T/2-t_1)H/\hbar}|-a\rangle_0\langle -a|e^{-(t_1+T/2)H/\hbar}|-a\rangle_0}{z_0} \tag{2.136}$$

が得られる．ここで(2.135)を用いれば，$z_2 \to (z_1)^2/z_0 = K^2 z_0$となる．ここまでは$t_0 \gg \bar{t}_0$としてその$K$依存性は無視してきたが，実は以下でみるように，$t_0$依存性がある．これを考慮に入れ，

$$\int_{-T/2}^{T/2} dt_0 \int_{-T/2}^{t_0} d\bar{t}_0 = \frac{1}{2}\int_{-T/2}^{T/2} dt_0 d\bar{t}_0$$

の関係に注意すれば

$$z_2 = \frac{1}{2!}K^2 z_0 \tag{2.137}$$

と求まる．$2n$個の寄与も同様に計算され，

$$z_{2n} = \frac{1}{(2n)!}K^{2n} z_0 \tag{2.138}$$

これらすべてを加えあわせて，

$$z(T) = \sum_{n=0}^{\infty} z_{2n} = (\cosh K) z_0 \tag{2.139}$$

と，分配関数がKにより与えられた．そこで次にKを計算する．

(2.132)で，(2.116)の公式を用いるにあたって必要なものは，古典的作用の値と Van Vleck 行列式であった．インスタントン解(2.129)の古典作用は，

$$\begin{aligned} S_c \equiv S_E[q^c] &= \int_{-T/2}^{T/2} dt \left\{\frac{m}{2}(\dot{q}^c)^2 + V(q^c)\right\} \\ &= 2\int_{-T/2}^{T/2} dt\, V(q^c) = \frac{2}{3}m\omega a^2 \end{aligned} \tag{2.140}$$

ここで，2行目の等式の導出には，“エネルギー保存則”（$T\to\infty$の下で）

$$-\frac{m}{2}(\dot{q}^{\mathrm{c}})^2+V(q^{\mathrm{c}}) = 0 \tag{2.141}$$

を用いた．また，最後の積分結果でも $T\to\infty$ とした．Van Vleck 行列式を求めるためには，安定条件(2.112)，$u_n(T/2)=u_n(-T/2)=0$

$$\begin{aligned}\left[-m\frac{d^2}{dt^2}+V''(q^{\mathrm{c}})\right]u_n(t) &= \left[-m\frac{d^2}{dt^2}+\frac{m\omega^2}{2}\left(3\tanh^2\frac{\omega t}{2}-1\right)\right]u_n(t)\\ &= \Omega_n{}^2u_n(t) \qquad (n\geqq 0)\end{aligned} \tag{2.142}$$

で $\Omega_n{}^2>0$ を調べなければならない(ここでは $n\geqq 0$ とした)．ところが，実際解いてみると*，一番小さい固有値がゼロ

$$\Omega_0{}^2 = 0$$

となっており，安定条件をみたさない．これを**ゼロモード問題**という．実はこうした事情は一般的で，運動方程式

$$-m\ddot{q}^{\mathrm{c}}+V'(q^{\mathrm{c}}) = 0 \tag{2.143}$$

の解が時間に依存していると，必ず生じる．というのは，(2.143)をもう一度時間で微分した

$$\left[-m\frac{d^2}{dt^2}+V''(q^{\mathrm{c}})\right]\dot{q}^{\mathrm{c}} = 0 \tag{2.144}$$

が，(2.142)に零固有値を与えるからである**．物理的には，時間並進に関する対称性のため，解を時間方向に動かすにはエネルギーがいらないということである．この点に関して，(2.129)の議論，すなわち時間並進対称性のために解にパラメータ t_0 の自由度が生じたということを思い出すと，このゼロモード問題はうまく処理できる．

以前の変数変換の式(2.114)(こんどは $q^{\mathrm{c}}(t)$ もきちんと書いて)

---

* L.D. ランダウ，E.M. リフシッツ著，好村滋洋ほか訳：量子力学 1 (東京図書，1983)，83 ページの問題 5 より，2 個の離散スペクトルと連続スペクトルからなっている．この結果を用いると，Van Vleck 行列式は計算できるのだが，以下では，一般的なポテンシャルに関して議論を進めていく．

** この意味で，前節の古典解を $q^{\mathrm{c}}(t)$ と書いたのは正確でなかった．安定条件(2.112)がみたされていたのだから，時間依存性はあってはいけなかった．

$$q(t) = q^{\mathrm{c}}(t) + \sqrt{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} q_n u_n(t) \tag{2.114$'$}$$

で導入されたGauss積分(2.115)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{\infty} \frac{dq_n}{\sqrt{2\pi}} e^{-\Omega_n{}^2 q_n{}^2/2} = \left[\prod_{n=0}^{\infty} \Omega_n{}^2 \right]^{-1/2} \tag{2.115}$$

が，零固有値のために無限大になってしまうのが，ゼロモード問題であった．(2.115)の左辺でいえば，q_0 積分がGauss積分でなくなるために，無限大が生じる．ところがこの無限大は，時間 T 程度のものである．それをみるには，零固有値の固有関数が，(2.144)より

$$u_0(t) = \sqrt{\frac{m}{S_{\mathrm{c}}}} \dot{q}^{\mathrm{c}}(t) \tag{2.145}$$

と与えられることに注意しよう．ここに，$u_0(t)$ は1に規格化をして，規格化因子は(2.140)と(2.141)を利用することにより求めた．(2.145)を，(2.112)にパラメータ t_0 を入れた式に代入すると，

$$\begin{aligned} q(t) &= q^{\mathrm{c}}(t-t_0) + \sqrt{\frac{m\hbar}{S_{\mathrm{c}}}} q_0 \dot{q}^{\mathrm{c}}(t-t_0) + \sqrt{\hbar} \sum_{n\neq 0} q_n u_n(t-t_0) \\ &= q^{\mathrm{c}}\left(t - t_0 + \sqrt{\frac{m\hbar}{S_{\mathrm{c}}}} q_0\right) + \sqrt{\hbar} \sum_{n\neq 0} q_n u_n\left(t - t_0 + \sqrt{\frac{m\hbar}{S_{\mathrm{c}}}} q_0\right) + O(\hbar) \end{aligned} \tag{2.146}$$

と変形できて，q_0 は時間パラメータ t_0 と

$$q_0 \sim \sqrt{\frac{S_{\mathrm{c}}}{m\hbar}} t_0 \tag{2.147}$$

のように同一視すべきことがわかる．したがって，(2.115)の左辺は，

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} dt_0 \sqrt{\frac{S_{\mathrm{c}}}{2\pi m\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n\neq 0} \frac{dq_n}{\sqrt{2\pi}} e^{-\Omega_n{}^2 q_n{}^2/2} &= T \sqrt{\frac{S_{\mathrm{c}}}{2\pi m\hbar}} \left[\prod_{n\neq 0} \Omega_n{}^2 \right]^{-1/2} \\ &\equiv T \sqrt{\frac{S_{\mathrm{c}}}{2\pi m\hbar}} \left[\det{}' \left(-m \frac{d^2}{dt^2} + V''(q^{\mathrm{c}}) \right) \right]^{-1/2} \end{aligned} \tag{2.148}$$

と書ける．det′(　)の意味は零固有値を抜くことを示す．記法は(2.142)の左辺に従った．こうしてゼロモードの処理が終わった．そこで，(2.132)の K に

公式(2.116)を適用すると，分母のほうでは(2.125)，(2.126)などを，分子では，(2.140)，(2.148)を考慮して，

$$K = e^{-S_c/\hbar}T\sqrt{\frac{S_c}{2\pi m\hbar}}\left[\frac{\det\left(-m\dfrac{d^2}{dt^2}+m\omega^2\right)}{\det'\left(-m\dfrac{d^2}{dt^2}+V''(q^c)\right)}\right]^{1/2} \qquad (2.149)$$

と求まる．(2.149)を(2.139)に代入し，$T\to\infty$ とすることで，基底状態のエネルギーは，

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}-\lim_{T\to\infty}\frac{\hbar K}{T} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}-e^{-S_c/\hbar}\sqrt{\frac{\hbar S_c}{2\pi m}}\left[\frac{\det\left(-m\dfrac{d^2}{dt^2}+m\omega^2\right)}{\det'\left(-m\dfrac{d^2}{dt^2}+V''(q^c)\right)}\right]^{1/2} \end{aligned} \qquad (2.150)$$

ここに，第1項目は z_0 の基底状態(2.42)で，インスタントン，すなわちトンネル効果のためエネルギーが下がったことが理解できる．残った仕事は，(2.150)の最後の Van Vleck 行列式の比を計算することである*．

問題をもう一度整理しよう．固有値問題(2.142)を解くことである．一般的に定式化する．

$$\begin{aligned} D\phi_n &\equiv \left[-\frac{d^2}{dt^2}+U(t)\right]\phi_n(t) = \lambda_n\phi_n(t) \\ \phi_n\left(\pm\frac{T}{2}\right) &= 0 \end{aligned} \qquad (2.151)$$

ここで，ポテンシャル $U(t)$ は $t=[-T/2, +T/2]$ で有限であるとしよう．ところで，次の事実に着目しよう．微分方程式

$$D\psi_\lambda = \left[-\frac{d^2}{dt^2}+U(t)\right]\psi_\lambda(t) = \lambda\psi_\lambda(t) \qquad (2.152)$$

を

* これからの議論は，S. Coleman: The Uses of Instantons, in *Aspects of Symmetry* (Cambridge Univ. Press, 1985)の p. 268 による．

$$\psi_\lambda(-T/2)=0, \qquad \left.\frac{d}{dt}\psi_\lambda(t)\right|_{-T/2}=1 \tag{2.153}$$

で解いた $\psi_\lambda(t)$ は，(2.151)の固有値を λ がとるとき，そのときに限って，

$$\psi_{\lambda n}(T/2)=0 \tag{2.154}$$

となる．それは，(2.151)と(2.152)(および部分積分)から得られる

$$(\lambda-\lambda_n)\int_{-T/2}^{T/2}dt\phi_n(t)\psi_\lambda(t)=\dot{\phi}_n(T/2)\psi_\lambda(T/2)$$

から見てとることができる．(2.154)の性質より

$$\left(\frac{\det(D^{(1)}-\lambda)}{\det(D^{(2)}-\lambda)}\equiv\right)\frac{\prod_n(\lambda_n{}^{(1)}-\lambda)}{\prod_n(\lambda_n{}^{(2)}-\lambda)}=\frac{\psi_\lambda{}^{(1)}(T/2)}{\psi_\lambda{}^{(2)}(T/2)} \tag{2.155}$$

と書ける．ここに，$\lambda_n{}^{(i)}, \psi_\lambda{}^{(i)}$ はそれぞれ $U^{(i)}(t)$ に対応する(2.151)の固有値，(2.152)の微分方程式の解である．次にこれを証明しよう．左辺は λ の有理型関数であり，$\lambda=\lambda_n{}^{(1)}$ で零点，$\lambda=\lambda_n{}^{(2)}$ で1次の極をもつ．$\lambda_n{}^{(i)}$ の大きいところでは，$U^{(i)}(t)$ の有限性のため，$\lambda_n{}^{(1)}=\lambda_n{}^{(2)}$ であること，および1次元ではレベルの縮退がないことから，レベルの数は分母子で等しいという事実より，左辺の分母子は λ の有限べきの関数で，その最高べきは互いに等しい．つまり，実軸上に沿った極限を除き，$\lambda\to\infty$ で左辺は1になる．(2.155)の右辺は，(2.154)より，極と零点についてまったく同じふるまいをし，(2.152)で $\lambda\to\infty$ とすれば，$\psi_\lambda{}^{(1)}(t)=\psi_\lambda{}^{(2)}(t)$ となるから，右辺も1になる．こうして，両辺は等しいことになる*.

さて，(2.155)を利用して，

$$R=\frac{\det' D^{(1)}}{\det D^{(0)}}=\frac{\psi_0{}^{(1)}(T/2)}{\lambda_0{}^{(1)}\psi_0{}^{(0)}(T/2)} \tag{2.156}$$

が得られる．ただし，

---

* レベルの縮退がない，1次元の特殊性を用いたので，多次元の Van Vleck 行列式の計算には使えない．多次元でも使える計算方法は，崎田文二，吉川圭二：径路積分による多自由度の量子力学(岩波書店，1986)の92ページを参照せよ．

$$D^{(1)}\psi_0^{(1)}(t) \equiv \left[-m\frac{d^2}{dt^2}+\frac{m\omega^2}{2}\left(3\tanh^2\frac{\omega t}{2}-1\right)\right]\psi_0^{(1)}(t) = 0$$
$$D^{(0)}\psi_0^{(0)}(t) \equiv \left[-m\frac{d^2}{dt^2}+m\omega^2\right]\psi_0^{(0)}(t) = 0 \tag{2.157}$$

および，$\lambda_0^{(1)}$ は $D^{(1)}$ の最小固有値で，$T\to\infty$ で $\lambda_0^{(1)}\to 0$ となるべきものである*．$\psi_0^{(0)}(t)$ は，(2.153)を考慮すれば

$$\psi_0^{(0)}(t) = \frac{1}{\omega}\sinh\omega\left(t+\frac{T}{2}\right) \tag{2.158}$$

で与えられる．$\psi_0^{(1)}(t)$ を作ろう．われわれはすでに，(2.157)の 1 つの解を知っている．それをいま $x(t)$ と書く．(2.145)と(2.129)より，

$$x(t) \equiv \sqrt{\frac{m}{S_c}}\dot{q}^c(t) = \frac{\omega a}{2}\sqrt{\frac{m}{S_c}}\operatorname{sech}^2\frac{\omega t}{2} \tag{2.159}$$

となる．その漸近形は

$$x(t) \xrightarrow[t\to\pm T/2]{} Ae^{-\omega|t|}$$
$$A \equiv 2\omega a\sqrt{\frac{m}{S_c}} = \sqrt{6\omega} \tag{2.160}$$

である．ここで，A の最後の表式の導出には，(2.140)を用いた．(これは，$T\to\infty$ としたものであった.) もう一方の解は，(2.157)(の $D^{(1)}$)で $t\to\pm T/2$ ($T\to\infty$)としたかたち(すなわち，$D^{(1)}\xrightarrow[t\to\pm T/2]{}D^{(0)}$)と，(2.160)の漸近形より，$e^{\omega|t|}$ のかたちをしているはずである．この解を $y(t)$ と書き，Wronskian で

$$x(t)\dot{y}(t)-\dot{x}(t)y(t) = 2\omega A^2 \tag{2.161}$$

と規格化する．(2.160)を代入すると，y の漸近形が

$$y(t) \xrightarrow[t\to\pm T/2]{} \pm Ae^{\omega|t|} \tag{2.162}$$

と求まる．x, y とその漸近形から，

---

* ゼロモード問題(2.144)のところで議論したように，有限領域 $t=[-T/2, T/2]$ ではゼロモードは生じない．しかし，その候補は当然，最小の固有値である．

$$\psi_0^{(1)}(t) = \frac{1}{2\omega A}(e^{\omega T/2}x(t) + e^{-\omega T/2}y(t)) \tag{2.163}$$

と，$\psi_0^{(1)}(t)$ が決定された．(2.158)と(2.163)より

$$\psi_0^{(0)}(T/2) = \frac{1}{\omega}\sinh\omega T, \qquad \psi_0^{(1)}(T/2) = \frac{1}{\omega} \tag{2.164}$$

が得られる．次に最小固有値 $\lambda_0^{(1)}$ を求めよう．(2.152)の解は，$x(t), y(t)$ を用いて，λ が小さいときには，

$$\psi_\lambda^{(1)}(t) = \psi_0^{(1)}(t) - \frac{\lambda}{2m\omega A^2}\int_{-T/2}^{t} dt'[y(t)x(t') - x(t)y(t')]\psi_0^{(1)}(t') \tag{2.165}$$

と書ける*．(2.165)で $t = T/2$ とおいて，漸近形(2.160)，(2.162)を代入すれば，

$$\begin{aligned}\psi_\lambda^{(1)}(T/2) &= \psi_0^{(1)}(T/2) - \frac{\lambda}{2m\omega A}\int_{-T/2}^{T/2} dt[e^{\omega T/2}x(t) - e^{-\omega T/2}y(t)]\psi_0^{(1)}(t) \\ &= \frac{1}{\omega} - \frac{\lambda}{4m\omega^2 A^2}\int_{-T/2}^{T/2} dt[e^{\omega T}x^2(t) - e^{-\omega T}y^2(t)]\end{aligned}$$

となる．2行目へは，(2.164)の右側の式と(2.163)を用い，$x(t), y(t)$ の直交性を使った．積分中の第2項は無視でき，$x(t)$ は1に規格化されているから，

$$\psi_\lambda^{(1)}(T/2) = \frac{1}{\omega}\left(1 - \frac{\lambda}{4m\omega A^2}e^{\omega T}\right)$$

となり，$\lambda = \lambda_0^{(1)}$ を入れ，(2.154)を用いることから

$$\lambda_0^{(1)} = 4m\omega A^2 e^{-\omega T} \tag{2.166}$$

と最小固有値が求まる．(2.164)，(2.166)を(2.156)に代入し，$T \to \infty$ とすると，

---

* (2.152)で λ が小さいとき，λ の1次で

$$D^{(1)}\psi_\lambda^{(1)} = \lambda\psi_0^{(1)}$$

と書いてよい．(2.165)は，x, y が(2.157)の解であり，(2.161)で規格化されていることを用いると，これをみたす．

$$R = \frac{e^{\omega T}}{4m\omega A^2 \sinh \omega T} \xrightarrow[T\to\infty]{} \frac{1}{2m\omega A^2} \tag{2.167}$$

が得られる．

(2.150)は，R を使って

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - \hbar e^{-S_c/\hbar} \sqrt{\frac{S_c}{2\pi m\hbar}} R^{-1/2}$$

と書けるから，(2.167)を入れて，(2.160)の A の値を考慮すると，

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - 2\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega a^2}{\pi\hbar}} e^{-2m\omega a^2/3\hbar} \tag{2.168}$$

と，トンネル効果を考慮した基底エネルギーが求まる．

(2.140)の作用の値が Planck 定数に比べて大きく，(2.131)の右辺が十分ゼロに近いためには，ω の値が大きければ大きいほどよい．すなわち，WKB 近似と希ガス近似がよい近似であるためには，ω が大きければ大きいほどよいことがわかる．

3 一般化への道

この章では，前章まで扱ってきた経路積分法を，より広い物理系へと拡張することを試みる．そのため，変数変換の議論を一般的に行ない，極座標の経路積分表示を作り上げる．次に，p や q がある領域内に閉じ込められた，いわゆる拘束系について考察し，Faddeev-Senjanovic の経路積分公式を球面に適用して調べてみる．さらに，q の領域に穴があいており，軌道の中に1点につぶしてしまうことができないものが存在する，いわゆる多重連結空間について，1次元円周上と Aharonov-Bohm 効果を例にとって議論する．最後に，スピンの経路積分とそこで導入された状態を応用して，調和振動子のこれまでと異なる経路積分表示を考察する．

3-1 変数変換

本節では経路積分での変数変換を議論する．一般的なハミルトニアン $H(P,Q)$ が与えられたとして，次の量

$$\hat{Z}_T \equiv \mathrm{Tr}\, e^{-iTH/\hbar} \tag{3.1}$$

を考えよう．いままでの Euclid 化の方法では虚数 i をつけずに考えたが，こ

こでは通常の時間推進演算子(1.9)のトレースを考える*. (3.1)の経路積分表示は, (1.73)で $\Delta t\to i\Delta t$ とし, 外場=0, $\alpha=-1/2$ (すなわち QP-順序(1.42))を採用し,

$$\hat{Z}_T = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\iint\frac{dp_j dq_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j\Delta q_j-\Delta tH(p_j,q_j)\right]\right\}\Bigg|_{\text{periodic}} \tag{3.2}$$

となる. ここで $H^{(\alpha=-1/2)}(p,q)=H(p,q)$ と書いた. 式(3.2)の指数関数の肩は, 形式的に連続極限 $N\to\infty$ としてみると,

$$pdq-H(p,q)dt$$

となり, 古典力学での正準変換の出発点

$$pdq-H(p,q)dt = PdQ-K(P,Q)dt+dF \tag{3.3}$$

を思い出すと, 経路積分中での変数変換が議論できそうに思える. そこでまず少し復習をしよう. もし, 変換の母関数 F として,

$$F = -PQ+F_2(P,q) \tag{3.4}$$

を採ると, (3.3)に代入し, dq, dP, dt の独立性を用いて,

$$p = \frac{\partial F_2}{\partial q}, \qquad Q = \frac{\partial F_2}{\partial P} \tag{3.5}$$

と正準変換 $(p,q)\to(P,Q)$ が定義され, 変換されたハミルトニアン(H が K になるので**カミルトニアン**(Kamiltonian)としばしばよばれる)は,

$$K(P,Q) = H(p,q) \tag{3.6}$$

と与えられる.

そこで, われわれの経路積分公式(3.2)でも, (3.3)にならって

$$p(j)\Delta q(j)-H(p(j),q(j))\Delta t = P(j)\Delta Q(j)-K(j)\Delta t+\Delta F(j) \tag{3.7}$$

と書く. ただし, F は時間の足 j に関して

$$\Delta F(j) = F(j)-F(j-1) \tag{3.8}$$

であり, 記法の都合上 $q_j, p_j\to q(j), p(j)$ と書くことにした. (3.3)の完全微分 dF と同様, 周期条件のため

---

* T を複素数と思って, $\mathrm{Im}\,T<0$ の方向へ解析接続してやれば, 分配関数((1.78)の下の式)が得られる. しかしここでは, (3.1)の物理的意味は問わないことにする.

$$\sum_{j=1}^{N} \Delta F(j) = 0 \tag{3.9}$$

であることに注意しよう．次に(3.4)にならい，

$$F(j) = -P(j+1)Q(j)+F_2(P(j+1),q(j)) \tag{3.10}$$

とおく．

$$\begin{aligned} -P(j+1)Q(j)+P(j)Q(j-1) &= -(P(j+1)-P(j))Q(j) \\ &\quad -P(j)(Q(j)-Q(j-1)) \end{aligned} \tag{3.11}$$

と変形すれば*，(3.7)は

$$p(j)\Delta q(j)-H(p(j),q(j))\Delta t = -\Delta P(j+1)Q(j)-K(j)\Delta t+\Delta F_2(j) \tag{3.12}$$

となる．ここで

$$\begin{aligned} \Delta F_2(j) &= [F_2(P(j+1),q(j))-F_2(P(j),q(j))] \\ &\quad +[F_2(P(j),q(j))-F_2(P(j),q(j-1))] \\ &\equiv \Delta_{P(j+1)}F_2|_{q(j)}+\Delta_{q(j)}F_2|_{P(j)} \end{aligned} \tag{3.13}$$

と書くと，

$$\left(p(j)-\frac{\Delta_{q(j)}F_2|_{P(j)}}{\Delta q(j)}\right)\Delta q(j)-H\Delta t = -\Delta P(j+1)\left(Q(j)-\frac{\Delta_{P(j+1)}F_2|_{q(j)}}{\Delta P(j+1)}\right)-K\Delta t$$

より，(3.5)に対応する経路積分での“正準変換”

$$p(j) = \frac{\Delta_{q(j)}F_2|_{P(j)}}{\Delta q(j)}, \qquad Q(j) = \frac{\Delta_{P(j+1)}F_2|_{q(j)}}{\Delta P(j+1)} \tag{3.14}$$

が定義され，カミルトニアンは

$$K(j) = H(p(j),q(j)) \tag{3.15}$$

となる．(3.14)で定義された変換は，

$$q(j) = q(P(j),Q(j);\Delta P(j+1))$$

$$p(j) = p(P(j),Q(j);\Delta P(j+1),\Delta P(j),\Delta Q(j))$$

---

* じつは，差分形では，Leibniz 法則 $d(f\cdot g)=df\cdot g+f\cdot dg$ が一意的でない．すなわち，$\Delta(f(j)g(j))=(\Delta(f(j))g(j)+f(j-1)\Delta g(j)=(\Delta f(j))g(j-1)+f(j)(\Delta g(j))$ であるから，(3.11)を含め，変換は無数に定義できる．しかし，とにかく1つ変換を決めて，その帰結を議論していこう．この事実は，後でも折りにふれ議論する．

となって，もし $\Delta P(j+1)\to 0$, $\Delta Q(j)\to 0$ であれば古典的な変換(3.5)と一致するが，経路積分中の $\Delta P(j+1)$ や $\Delta Q(j)$ などは無視できない量である．(このことは以下の議論を通して，理解できる.)

(3.14)のヤコビアンは

$$J \equiv \frac{\partial(p(j), q(j))}{\partial(P(j), Q(j))} = \frac{\partial}{\partial P(j)}\left(\frac{\Delta_{q(j)} F_2|_{P(j)}}{\Delta q(j)}\right)\left[\frac{\partial}{\partial q(j)}\left(\frac{\Delta_{P(j+1)} F_2|_{q(j)}}{\Delta P(j+1)}\right)\right]^{-1} \tag{3.16}$$

で与えられるから，(3.2)は

$$\hat{Z}_T = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \iint \frac{dP(j)dQ(j)}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{P(j)\Delta Q(j) - K(j)\Delta t\} + \ln J\right]\Bigg|_{\text{periodic}} \tag{3.17}$$

と新しい変数で書ける．ここで，

$$-\sum_{j=1}^{N} \Delta P(j+1)Q(j) = \sum_{j=1}^{N} P(j)\Delta Q(j) \tag{3.18}$$

を用いた．(3.16)で，変換が(3.14)の代わりに，連続での(3.5)であったなら $J=1$ であるが，一般的にはそうはならない．したがって，経路積分では，正準変換といえども，ヤコビアンは一般に1ではないのである*．以下では，いくつかの具体例について，調べてみよう．

恒等変換　連続での母関数

$$F_2(P, q) = Pq \tag{3.19}$$

より，(3.14)に代入して

$$p(j) = P(j), \qquad q(j) = Q(j) \tag{3.20}$$

となるので，ヤコビアンは1である．また，カミルトニアンは

$$K = H(P(j), Q(j)) \tag{3.21}$$

と求まる．

変換が一意的でないことは，恒等変換でももちろんいえる．たとえば(3.13)の代わりに，

＊ 変換が一意的でないこととは無関係である．どのような変換であっても，差分形でそれが定義されているかぎり，ヤコビアンは特殊な例を除いて1でない．

$$\Delta F_2(j) = \Delta_{q(j)} F_2|_{P(j+1)} + \Delta_{P(j+1)} F_2|_{q(j-1)} \tag{3.22}$$

を導入すると，

$$p(j) = P(j+1), \quad q(j) = Q(j+1) \tag{3.23}$$

が定義される．時間の足を，$j \to j+1$ とする変換で，連続では存在しない変換である．

無限小正準変換

$$F_2(P, q) = Pq + \Delta\theta G(P, q) \qquad (\Delta\theta \ll 1) \tag{3.24}$$

(3.14)に代入して，$O((\Delta\theta)^2)$ を無視すれば，

$$\begin{aligned} p(j) &= P(j) + \Delta\theta \frac{\Delta_{Q(j)} G|_{P(j)}}{\Delta Q(j)} \\ q(j) &= Q(j) - \Delta\theta \frac{\Delta_{P(j+1)} G|_{Q(j)}}{\Delta P(j+1)} \end{aligned} \tag{3.25}$$

であり，この近似内で $\Delta\theta G(P, q) = \Delta\theta G(P, Q)$ としてよいことを使った．ハミルトニアンは，（後の都合上，$\Delta\theta$ の展開はしないでおいて）

$$K(j) = H\left(P(j) + \Delta\theta \frac{\Delta_{Q(j)} G|_{P(j)}}{\Delta Q(j)},\ Q(j) - \Delta\theta \frac{\Delta_{P(j+1)} G|_{Q(j)}}{\Delta P(j+1)}\right) \tag{3.26}$$

となる．またヤコビアンは

$$J = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \Delta\theta \left\{-i\hbar \frac{\partial}{\partial P(j)} \left(\frac{\Delta_{Q(j)} G|_{P(j)}}{\Delta Q(j)}\right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial Q(j)} \left(\frac{\Delta_{P(j+1)} G|_{Q(j)}}{\Delta P(j+1)}\right)\right\}\right] \tag{3.27}$$

と指数関数の形で表わしておく．(3.26)と(3.27)を(3.17)に代入することより，新しい変数での経路積分表式が得られるが，(3.26)，(3.27)からわかるように，それは

$$\begin{aligned} \hat{Z}_T = \lim_{N \to \infty} \prod_{j=1}^{N} \iint \frac{dP(j) dQ(j)}{2\pi\hbar} \exp\Bigg[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \{P(j) \Delta Q(j) \\ - f(P(j), Q(j); \Delta P(j+1), \Delta Q(j))\}\Bigg]\Bigg|_{\text{periodic}} \end{aligned} \tag{3.28}$$

$$f \equiv \Delta t K(j) - i\hbar \ln J$$

の形をしており，まだ新しいハミルトニアンを特定したことになっていない．そのためには，f が $P(j)$ と $Q(j)$ だけの関数でなければならない．これは以下で述べるようにうまく処理できて，最終的な答えとして

$$\hat{Z}_T = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \iint \frac{dP(j)dQ(j)}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{P(j)\Delta Q(j) - \Delta t K_{\text{eff}}(P(j), Q(j))\}\right]\Bigg|_{\text{periodic}} \tag{3.29}$$

$$K_{\text{eff}}(P,Q) = H(P,Q) - \frac{i}{\hbar}\Delta\theta \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-i\hbar)^m}{m!}\left[\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m \left\{\frac{\partial^m G}{\partial P^m} H\right\} - \left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^m \left\{\frac{\partial^m G}{\partial Q^m} H\right\}\right] \tag{3.30}$$

が得られる．

これを証明しよう．まず第1ステップとして，**“置き換え則”** について議論する．(3.28)の指数関数の肩が，一般的に，次のように与えられたとしよう．

$$\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}[P(j)\Delta Q(j) + h(P(j), Q(j)) + \epsilon\{\Delta Q(j) f(j) + \Delta P(j+1) g(j)\}] \tag{3.31}$$

ただし，ϵ は無限小量で，$\Delta\theta$ や Δt がこれにあたる．$f(j), g(j)$ は P, Q の任意関数で，$P(j+1)$ とか $Q(j-1)$ などを含んでいてかまわない．置き換え則は，(3.31)で ϵ の { } の中で

$$\begin{aligned} \Delta P(j+1) &\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial Q(j)} \\ \Delta Q(j) &\to i\hbar\frac{\partial}{\partial P(j)} \end{aligned} \tag{3.32}$$

および $h(P(j), Q(j))$ で

$$\begin{aligned} P(j) &\to P(j) - \epsilon f(j) \\ Q(j) &\to Q(j) + \epsilon g(j) \end{aligned} \tag{3.33}$$

としてよいことを主張する．これが証明できれば，ふたたび ϵ まで h を展開して，(3.31)の形が得られて，順次 P, Q の足がそろっていくわけである．

(3.32)と(3.33)を証明しよう．まず，$O(\epsilon)$ までで，

$$\sum_{j=1}^{N}\left[P(j)\Delta Q(j)+\epsilon\{\Delta Q(j)f(j)+\Delta P(j+1)g(j)\}\right]$$
$$=\sum_{j=1}^{N}(P(j)+\epsilon f(j))\{(Q(j)-\epsilon g(j))-(Q(j-1)-\epsilon g(j-1))\} \quad (3.34)$$

と書けることに注意しよう．ここで，(3.18)および周期条件より

$$\sum_{j=1}^{N}\Delta P(j+1)g(j) = -\sum_{j=1}^{N}P(j)(g(j)-g(j-1))$$

を考慮した．(3.34)より，変数変換

$$P'(j) = P(j)+\epsilon f(j)$$
$$Q'(j) = Q(j)-\epsilon g(j)$$

を行ない*，ヤコビアンを(3.27)のように指数化すれば，(3.31)は，新しい変数(′(ダッシュ)は省いて)で

$$\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\Bigg[P(j)\Delta Q(j)+h(P(j)+\epsilon f(j),Q(j)-\epsilon g(j))$$
$$+\epsilon\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial P(j)}f(j)-i\hbar\frac{\partial}{\partial Q(j)}g(j)\right\}\Bigg]$$

と書ける．(3.31)と比べると置き換え則(3.32)，(3.33)が出る．さて，(3.31)の形にするため(3.26)と(3.27)を変形する．そのため，Taylor 展開を用いて

$$\frac{\Delta_{Q(j)}G|_{P(j)}}{\Delta Q(j)} \equiv \frac{G(P(j),Q(j))-G(P(j),Q(j-1))}{\Delta Q(j)}$$
$$=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-)^m}{(m+1)!}(\Delta Q)^m\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m+1}G(P,Q)$$
$$\frac{\Delta_{P(j+1)}G|_{Q(j)}}{\Delta P(j+1)} \equiv \frac{G(P(j+1),Q(j))-G(P(j),Q(j))}{\Delta P(j+1)}$$
$$=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(m+1)!}(\Delta P)^m\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m+1}G(P,Q) \quad (3.35)$$

---

* このため，積分領域は $-\infty\leqq P,Q\leqq\infty$ であることが必要である．

と書く．最後の表式では，それぞれ j の足を省略した．以後も，しばらくこの表式を用いる．記号を導入しよう．

$$
\begin{aligned}
\delta^{(k)}P &\equiv (-)^{k+1}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-)^m}{(m+k+1)!}(\varDelta Q)^m\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m+1}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G(P,Q)\\
\delta^{(k)}Q &\equiv (-)^{k}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(m+k+1)!}(\varDelta P)^m\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m+1}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G(P,Q)
\end{aligned}
\tag{3.36}
$$

これを用いれば，(3.35)は

$$
\begin{aligned}
\delta^{(0)}P &= -\frac{\varDelta_{Q(j)}G|_{P(j)}}{\varDelta Q(j)}\\
\delta^{(0)}Q &= \frac{\varDelta_{P(j+1)}G|_{Q(j)}}{\varDelta P(j+1)}
\end{aligned}
\tag{3.37}
$$

と書ける．また，次の関係はただちにわかるであろう．

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\delta^{(k)}P+i\hbar\frac{\partial}{\partial Q}\delta^{(k)}Q = \varDelta Q\,\delta^{(k+1)}P-\varDelta P\,\delta^{(k+1)}Q \tag{3.38}
$$

以上の準備の下に，われわれの経路積分公式(3.28)の指数関数の肩は，(3.26)，(3.27)へ(3.37)を代入して

$$
\frac{i}{\hbar}\sum_j\left[P\varDelta Q-\varDelta tH(P-\varDelta\theta\delta^{(0)}P,\,Q-\varDelta\theta\delta^{(0)}Q)+\varDelta\theta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\delta^{(0)}P+i\hbar\frac{\partial}{\partial Q}\delta^{(0)}Q\right)\right]
$$

と書ける．最後の $\varDelta\theta$ の項に，まず(3.38)を用いて，次に置き換え則(3.32)，(3.33)を使うと，

$$
\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}\sum_j\Bigg[&P\varDelta Q-\varDelta tH\left(P-\varDelta\theta\sum_{k=0}^{1}\delta^{(k)}P,\,Q-\varDelta\theta\sum_{k=0}^{1}\delta^{(k)}Q\right)\\
&+\varDelta\theta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\delta^{(1)}P+i\hbar\frac{\partial}{\partial Q}\delta^{(1)}Q\right)\Bigg]
\end{aligned}
$$

となる．くりかえして，結局，

$$
\frac{i}{\hbar}\sum_j\left[P\varDelta Q-\varDelta tH\left(P-\varDelta\theta\sum_{k=0}^{\infty}\delta^{(k)}P,\,Q-\varDelta\theta\sum_{k=0}^{\infty}\delta^{(k)}Q\right)\right]
$$

が得られる．こうしておいて，ハミルトニアンを $O(\varDelta\theta)$ まで展開し，

$$\frac{i}{\hbar}\sum_j \left[P\Delta Q-\Delta t\left\{H(P,Q)-\Delta\theta\sum_{k=0}^{\infty}\left(\delta^{(k)}P\frac{\partial}{\partial P}+\delta^{(k)}Q\frac{\partial}{\partial Q}\right)H(P,Q)\right\}\right]$$

今度は Δt に関して置き換え則を用いる．すなわち，(3.36)の $\Delta Q, \Delta P$ に(3.32)だけを用いて((3.33)は Δt がすでに $H(P,Q)$ にかかっているので $O((\Delta t)^2)$ を生みだすだけである)，

$$K_{\mathrm{eff}}(P,Q)\equiv H(P,Q)+\Delta\theta\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)^m\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m+1}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^k}{(m+k+1)!}\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.\times\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G\right)\right\}\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)\right]+\Delta\theta\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m+1}\right.\right.$$
$$\left.\left.\times\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^{k+1}}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G\right)\right\}\left(\frac{\partial H}{\partial Q}\right)\right] \tag{3.39}$$

と足のそろった新しいハミルトニアンが得られた．(3.39)は(3.30)と書ける．それをみるには，(3.39)の第2項，第3項がそれぞれ，

$$\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)^m\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m+1}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^k}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G\right)\right\}\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)\right]$$
$$=\frac{i}{\hbar}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-i\hbar)^m}{m!}\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^m\left\{\left(\frac{\partial^m G}{\partial Q^m}\right)H\right\}-\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-)^k}{k!}\left\{\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G\right\}H \tag{3.40}$$

および，

$$\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m+1}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^{k+1}}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G\right)\right\}\left(\frac{\partial H}{\partial Q}\right)\right]$$
$$=-\frac{i}{\hbar}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-i\hbar)^m}{m!}\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m\left\{\left(\frac{\partial^m G}{\partial P^m}\right)H\right\}+\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-)^k}{k!}\left\{\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^k G\right\}H \tag{3.41}$$

となることがわかればよい．双方加えると，(3.30)が出るからである．結局，(3.40)を調べればよいことになる．(3.41)は，$P\leftrightarrow Q$ の入れ換えで出る．(3.40)の左辺で，H の微分をはずして，

(3.40)の左辺

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m+1}\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m+1}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^k}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^{k}G\right)\right\}H\right]$$
$$-\frac{i}{\hbar}\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m}\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^k}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^{k+1}G\right)\right\}H\right]$$

と書き，第1項で，$m\to m-1, k\to k+1$ と変えて，

(3.40)の左辺

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_{m=1}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m}\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m}\left(\sum_{k=-1}^{\infty}\frac{(-)^k}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^{k+1}G\right)\right\}H\right]$$
$$-\frac{i}{\hbar}\sum_{m=0}^{\infty}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)^{m}\left[\left\{\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{m}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^k}{(m+k+1)!}\left(i\hbar\frac{\partial^2}{\partial P\partial Q}\right)^{k+1}G\right)\right\}H\right]$$

としてみれば，2項の間での打ち消し合いが起こることは明白であり，残った項が(3.40)の右辺である．以上で(3.29)，(3.30)の証明を終えた．

これで，無限小正準変換については，経路積分として完全に定式化されたわけであるが，その演算子形式との対応関係を少し調べてみよう．つまり(3.29)の $\hat{Z}_T$ はいまや

$$\hat{Z}_T = \mathrm{Tr}\, e^{-iTK/\hbar} \left(= \mathrm{Tr}\, e^{-iTH^{(\mathrm{op})}/\hbar}\right) \tag{3.42}$$

と，ある演算子カミルトニアン K で与えられており，それはもとのハミルトニアンと，

$$K = V^{-1}H^{(\mathrm{op})}V \tag{3.43}$$

で結ばれているはずで，こうした V を知ろうということである．K は P, Q の足がそろう $\alpha=-1/2$ の QP-順序をとっていたことを思い出そう．すなわち，K_{eff} (3.30)は，

$$\langle Q|K|P\rangle = \frac{e^{iPQ/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}K_{\mathrm{eff}}(P, Q) \tag{3.44}$$

である．すると，(3.43)の V は

$$V \equiv \exp\frac{i}{\hbar}\Delta\theta G^{(\mathrm{op})} \tag{3.45}$$

で，演算子 $G^{(\mathrm{op})}$ は，経路積分の G と

$$\langle P|G^{(\mathrm{op})}|Q\rangle = \frac{e^{-iPQ/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}G(P,Q) \tag{3.46}$$

という関係にあることがわかる．つまり，われわれの <u>G を PQ-順序で並べた</u>ものが，対応する演算子変換である．（この結果は，採用した演算子順序によらない．どうしてかは，各自考えてみよう.）

これを証明しよう．(3.45)を(3.43)に代入し

$$K = H^{(\mathrm{op})}-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta[G^{(\mathrm{op})},H^{(\mathrm{op})}]+O((\Delta\theta)^2)$$

と展開する．これを(3.44)に代入し(3.30)を思い出すと，もし，

$$\langle Q|[G^{(\mathrm{op})},H^{(\mathrm{op})}]|P\rangle = \frac{e^{iPQ/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-i\hbar)^m}{m!}\left[\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m\left\{\frac{\partial^m G}{\partial P^m}H\right\}\right.$$
$$\left.-\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^m\left\{\frac{\partial^m G}{\partial Q^m}H\right\}\right]$$

であれば題意は示されたことになる．このことは次のようにしてわかる．$G^{(\mathrm{op})}$ が(3.46)をみたし，ハミルトニアンが QP-順序

$$\langle Q|H^{(\mathrm{op})}|P\rangle = \frac{e^{iPQ/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}H(P,Q) \tag{3.47}$$

であることを考慮すると，簡単な計算で

$$\langle Q|G^{(\mathrm{op})}H^{(\mathrm{op})}|P\rangle = \frac{e^{iPQ/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-i\hbar)^m}{m!}\left(\left(\frac{\partial}{\partial Q}\right)^m\left\{\frac{\partial^m G}{\partial P^m}H\right\}\right)$$

$$\langle Q|H^{(\mathrm{op})}G^{(\mathrm{op})}|P\rangle = \frac{e^{iPQ/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-i\hbar)^m}{m!}\left(\left(\frac{\partial}{\partial P}\right)^m\left\{\frac{\partial^m G}{\partial Q^m}H\right\}\right)$$

が示せる．($H^{(\mathrm{op})}=\sum_{m,n}H_{mn}(Q^{\mathrm{op}})^m(P^{\mathrm{op}})^n$，$G^{(\mathrm{op})}=\sum_{m,n}G_{mn}(P^{\mathrm{op}})^m(Q^{\mathrm{op}})^n$ とおけばよい.）証明終わり．

ここで無限小正準変換の例題を調べてみよう．

$$G = \frac{P^2}{2}+\frac{\kappa^2}{2}Q^2 \tag{3.48}$$

κはパラメータである．(3.25)より，変換は，

$$p(j) = P(j)+\Delta\theta\kappa^2\bar{Q}(j), \qquad q(j) = Q(j)-\Delta\theta\bar{P}(j) \tag{3.49}$$

ここに

$$\bar{Q}(j) \equiv \frac{Q(j)+Q(j-1)}{2}, \qquad \bar{P}(j) \equiv \frac{P(j+1)+P(j)}{2} \tag{3.50}$$

と求まる．この場合のヤコビアンは1である．(3.30)に(3.48)を代入し，

$$\begin{aligned} K_{\mathrm{eff}}(P,Q) &= H(P,Q)+\Delta\theta\left(\kappa^2 Q\frac{\partial}{\partial P}-P\frac{\partial}{\partial Q}\right)H(P,Q) \\ &\quad +\frac{i\hbar\Delta\theta}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial Q^2}-\kappa^2\frac{\partial^2}{\partial P^2}\right)H(P,Q) \end{aligned} \tag{3.51}$$

変換されたハミルトニアンが求まる．

演算子形式での対応関係は，(3.46)より

$$V = \exp\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\left(\frac{(P^{\mathrm{op}})^2}{2}+\frac{\kappa^2}{2}(Q^{\mathrm{op}})^2\right) \tag{3.52}$$

で，ユニタリー変換である．このVでハミルトニアンを(3.43)のように変換してみると，(3.51)の第3項は演算子順序から生じることがわかる．

もう1つの興味ある問題として，極座標表示の経路積分公式を議論しよう．これが興味ある理由としては，極座標での量子力学

$$\begin{gathered} [r,P_r] = i\hbar, \qquad [\theta,P_\theta] = i\hbar, \qquad [\varphi,P_\varphi] = i\hbar \\ (0\leqq r<\infty,\ 0\leqq\theta\leqq\pi,\ 0\leqq\varphi<2\pi) \end{gathered} \tag{3.53}$$

では，P_r, P_θなどは自己共役演算子ではない*．したがって，第1章でのように$|P_r\rangle, |P_\theta\rangle, \cdots$を基礎として経路積分表示を，

$$H = \frac{1}{2m}\left(P_r{}^2+\frac{P_\theta{}^2}{r^2}+\frac{P_\varphi{}^2}{r^2\sin^2\theta}\right)+V(r,\theta,\varphi) \tag{3.54}$$

のハミルトニアンから作り上げることはできない．われわれはこの問題を，Descartes座標での経路積分表示から，正準変換の手法を用いることにより扱

---

* 正準交換関係$[q,p]=i\hbar$をみたす自己共役演算子q,pの固有値は，ともに$-\infty$から$+\infty$に至る連続値をとる．

おうというわけである．

座標系の変換は，**点正準変換**(point canonical transformation)とよばれ，p と q とを混ぜないので，(3.1)の表式より一般的な Feynman 核(1.45)

$$K(\boldsymbol{q}_{\mathrm{f}},\boldsymbol{q}_{\mathrm{i}};t_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{i}}) = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}d^3\boldsymbol{q}(j)\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\boldsymbol{p}(j)}{(2\pi\hbar)^3}\exp\Bigg[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{\boldsymbol{p}(j)\Delta\boldsymbol{q}(j) - \Delta t H(\boldsymbol{p}(j),\boldsymbol{q}(j))\}\Bigg]_{\boldsymbol{q}_{\mathrm{f}}\equiv\boldsymbol{q}_N,\,\boldsymbol{q}_{\mathrm{i}}\equiv\boldsymbol{q}_0} \tag{3.55}$$

を出発点とすることができる．(容易にわかるように，ここでは，$\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{q}$ の積分の個数が異なるので，一般の p,q を混ぜる正準変換の議論は複雑である．われわれが，トレース公式(3.1)を出発点にしたのは，こうした理由があった.)

さてふたたび古典力学の知識より

$$\begin{aligned} F &\equiv \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{p} - F_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q}) \\ F_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q}) &\equiv \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q}) \end{aligned} \tag{3.56}$$

ただし，

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q}) \equiv (r\sin\theta\cos\varphi,\ r\sin\theta\sin\varphi,\ r\cos\theta) \\ &\boldsymbol{P} \equiv (P_r,P_\theta,P_\varphi), \qquad \boldsymbol{Q} \equiv (r,\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{3.57}$$

とする．(3.7)に(3.56)を代入すると*，

$$-\Delta\boldsymbol{p}(j+1)\cdot\boldsymbol{q}(j) - H(\boldsymbol{p}(j),\boldsymbol{q}(j))\Delta t = \boldsymbol{P}(j)\cdot\Delta\boldsymbol{Q}(j) - K(j)\Delta t - \Delta F_3(j) \tag{3.58}$$

で，$\Delta F_3(j)$ として，

$$\Delta F_3(j) = F_3(j) - F_3(j-1) = \Delta\boldsymbol{p}(j+1)\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q}(j)) + \boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta_{\varphi(j)}\boldsymbol{q}|_{r(j),\theta(j)} + \boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta_{\theta(j)}\boldsymbol{q}|_{r(j),\varphi(j-1)} + \boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta_{r(j)}\boldsymbol{q}|_{\theta(j-1),\varphi(j-1)} \tag{3.59}$$

ただし，(3.13)の表式

$$\Delta_{\varphi(j)}\boldsymbol{q}|_{r(j),\theta(j)} \equiv \boldsymbol{q}(r(j),\theta(j),\varphi(j)) - \boldsymbol{q}(r(j),\theta(j),\varphi(j-1))$$

$$\Delta_{\theta(j)}\boldsymbol{q}|_{r(j),\varphi(j-1)} \equiv \boldsymbol{q}(r(j),\theta(j),\varphi(j-1)) - \boldsymbol{q}(r(j),\theta(j-1),\varphi(j-1))$$

などを使った．(3.59)を(3.58)に入れると，次のように変数変換が定義される．

---

* 周期条件はないが，$\boldsymbol{p}(N+1)=0$ と，$\boldsymbol{q}_i=\boldsymbol{q}_i(\boldsymbol{Q}_i)$ と変換することで，和 $\sum_{j=1}^{N}$ の中でのおつりの表面項は消える．

$$
\begin{aligned}
P_r(j) &= \frac{1}{\Delta r(j)}\boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta_{r(j)}\boldsymbol{q}\big|_{\theta(j-1),\varphi(j-1)} \\
P_\theta(j) &= \frac{1}{\Delta\theta(j)}\boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta_{\theta(j)}\boldsymbol{q}\big|_{r(j),\varphi(j-1)} \\
P_\varphi(j) &= \frac{1}{\Delta\varphi(j)}\boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta_{\varphi(j)}\boldsymbol{q}\big|_{r(j),\theta(j)}
\end{aligned}
\tag{3.60}
$$

$$
\boldsymbol{q}(j) = (r(j)\sin\theta(j)\cos\varphi(j),\ r(j)\sin\theta(j)\sin\varphi(j),\ r(j)\cos\theta(j))
$$

カミルトニアンは，

$$
K(j) = H(\boldsymbol{p}(j),\boldsymbol{q}(j)) \tag{3.61}
$$

となり，変換に対する積分測度は，

$$
\begin{aligned}
d^3\boldsymbol{p}(j) &= \frac{1}{r(j)^2\sin\theta(j)}\frac{\Delta\theta(j)}{\sin\Delta\theta(j)}\frac{\Delta\varphi(j)}{\sin\Delta\varphi(j)}dP_r(j)dP_\theta(j)dP_\varphi(j) \\
d^3\boldsymbol{q}(j) &= r(j)^2\sin\theta(j)dr(j)d\theta(j)d\varphi(j)
\end{aligned}
\tag{3.62}
$$

となる．(3.61)をあらわに書こう．(3.60)を逆に $\boldsymbol{p}$ で解くと

$$
p_a(j) = A_{ab}(j)P_b(j) \tag{3.63}
$$

$A_{ab}(j) \equiv$

$$
\begin{pmatrix}
\dfrac{\sin\bar\theta(j)\cos\bar\varphi(j)}{\cos\left(\dfrac{\Delta\theta(j)}{2}\right)\cos\left(\dfrac{\Delta\varphi(j)}{2}\right)}, & \dfrac{\Delta\theta(j)\cos\theta(j-1)\cos\bar\varphi(j)}{r(j)\sin(\Delta\theta(j))\cos\left(\dfrac{\Delta\varphi(j)}{2}\right)}, & -\dfrac{\Delta\varphi(j)\sin\varphi(j-1)}{r(j)\sin\theta(j)\sin(\Delta\varphi(j))} \\
\dfrac{\sin\bar\theta(j)\sin\bar\varphi(j)}{\cos\left(\dfrac{\Delta\theta(j)}{2}\right)\cos\left(\dfrac{\Delta\varphi(j)}{2}\right)}, & \dfrac{\Delta\theta(j)\cos\theta(j-1)\sin\bar\varphi(j)}{r(j)\sin(\Delta\theta(j))\cos\left(\dfrac{\Delta\varphi(j)}{2}\right)}, & \dfrac{\Delta\varphi(j)\cos\varphi(j-1)}{r(j)\sin\theta(j)\sin(\Delta\varphi(j))} \\
\dfrac{\cos\bar\theta(j)}{\cos\left(\dfrac{\Delta\theta(j)}{2}\right)}, & -\dfrac{\Delta\theta(j)\sin\theta(j-1)}{r(j)\sin(\Delta\theta(j))}, & 0
\end{pmatrix}
$$

と少し面倒な計算の後で求まる．ここで，$\bar\theta(j), \bar\varphi(j)$ は，(3.50)の左側の表式である．

一方，(3.62)から変換のヤコビアンは，

$$
\prod_{j=1}^{N}\left(\frac{\Delta\theta(j)}{\sin\Delta\theta(j)}\frac{\Delta\varphi(j)}{\sin\Delta\varphi(j)}\right) \equiv \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}[\delta P_\theta(j)\Delta\theta(j)+\delta P_\varphi(j)\Delta\varphi(j)]\right]
\tag{3.64a}
$$

$$\delta P_\theta(j) \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\Delta\theta(j)}\ln\left(\frac{\Delta\theta(j)}{\sin\Delta\theta(j)}\right) = \frac{\hbar}{i}\sum_{n=1}^{\infty} a_n(\Delta\theta(j))^{2n-1}$$
$$\delta P_\varphi(j) \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\Delta\varphi(j)}\ln\left(\frac{\Delta\varphi(j)}{\sin\Delta\varphi(j)}\right) = \frac{\hbar}{i}\sum_{n=1}^{\infty} a_n(\Delta\varphi(j))^{2n-1} \tag{3.64b}$$

となる．ただしここで，B_n を Bernoulli 数として

$$a_n \equiv \frac{2^{2n-1}B_n}{(2n)!n}$$

と書いた．指数関数の肩で，$P_\theta \to P_\theta - \delta P_\theta$, $P_\varphi \to P_\varphi - \delta P_\varphi$ とシフト*すれば，(3.61)は(3.63)を用いて，

$$\begin{aligned} K(j) &= H(A_{ab}(j)(P_b(j)-\delta P_b(j)), \boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q}(j))) \\ &\equiv K(\boldsymbol{P}(j), \boldsymbol{Q}(j); \Delta\boldsymbol{Q}(j)) \end{aligned} \tag{3.65}$$

と書ける．もちろん，$\delta P_r(j)=0$ である．最後の表式では，$\delta P_\theta, \delta P_\varphi$ が(3.64)を見ればわかるように $\Delta\theta(j)$ と $\Delta\varphi(j)$ で書けていることを考慮した．(3.65)の形に求まれば，(3.31)で $\epsilon=\Delta t$ として置き換え則を用いれば，足のそろったハミルトニアンが

$$K_{\text{eff}}(\boldsymbol{P}(j), \boldsymbol{Q}(j)) = K\left(\boldsymbol{P}(j), \boldsymbol{Q}(j); i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{P}(j)}\right) \tag{3.66}$$

と求まる**．(3.66)の意味は，(3.65)の K を $\Delta\boldsymbol{Q}$ で展開し，$i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{P})$ と代えよということである．

このようにして変換された Feynman 核は

$$\begin{aligned} K(\boldsymbol{Q}_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{Q}_{\mathrm{i}}; t_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{i}}) = &\frac{1}{r_{\mathrm{f}}^2\sin\theta_{\mathrm{f}}}\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{dP_r(j)dP_\theta(j)dP_\varphi(j)}{(2\pi\hbar)^3}\prod_{j=1}^{N-1}\int_0^\infty dr(j) \\ &\times\int_0^\pi d\theta(j)\int_0^{2\pi}d\varphi(j)\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{P_r(j)\Delta r(j)+P_\theta(j)\Delta\theta(j) \\ &+P_\varphi(j)\Delta\varphi(j)-\Delta t K_{\text{eff}}(\boldsymbol{P}(j), \boldsymbol{Q}(j))\}\Big] \end{aligned} \tag{3.67}$$

---

* $\delta P_\theta, \delta P_\varphi$ は純虚数となり，新しい変数は複素数となるが，Euclid 化した(3.55)を考えておけば積分領域を少し変更するだけだから問題ない．つまり，$\mathrm{Im}\,T<0$ としておく．

** 置き換え則 $\Delta\boldsymbol{P} \to -i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{Q})$ は使えない．いま，$-\infty<\boldsymbol{Q}<\infty$ でないからである．しかし点変換では，$\boldsymbol{q}$ しか変換せず，$\boldsymbol{p}$ の変換は(3.60)，(3.63)のように j の足が p の中では混じらないので，この問題はない．

と書ける．ハミルトニアン H が，

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{q}) \tag{3.68}$$

で与えられるとき，(3.63)と(3.65)を考慮して少し計算すると，

$$K_{\mathrm{eff}}=\frac{1}{2m}\left(P_r{}^2+\frac{P_\theta{}^2}{r^2}+\frac{P_\varphi{}^2}{r^2\sin^2\theta}\right)+\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{P_r}{r}+\frac{\cot\theta}{2r^2}P_\theta\right)-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{r^2}+\frac{\mathrm{cosec}^2\theta}{2r^2}\right)$$
$$+V(r,\theta,\varphi) \tag{3.69}$$

となる．

(3.67)で

$$\frac{1}{r_{\mathrm{f}}{}^2\sin\theta_{\mathrm{f}}}=\frac{1}{\sqrt{r_{\mathrm{f}}{}^2\sin\theta_{\mathrm{f}}}}\prod_{j=1}^{N}\left[\frac{r(j-1)^2\sin\theta(j-1)}{r(j)^2\sin\theta(j)}\right]^{1/2}\frac{1}{\sqrt{r_{\mathrm{i}}{}^2\sin\theta_{\mathrm{i}}}}$$

と書くと，右辺の真中の因子は新しいヤコビアンとなって，別の経路積分表式が求まる．それは(3.64)と同様の手続きを経て置き換え則を用いることで

$$K(\boldsymbol{Q}_{\mathrm{f}},\boldsymbol{Q}_{\mathrm{i}};t_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{i}})=\frac{1}{\sqrt{r_{\mathrm{f}}{}^2r_{\mathrm{i}}{}^2\sin\theta_{\mathrm{f}}\sin\theta_{\mathrm{i}}}}\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{dP_r(j)dP_\theta(j)dP_\varphi(j)}{(2\pi\hbar)^3}$$
$$\times\prod_{j=1}^{N-1}\int_0^\infty dr(j)\int_0^\pi d\theta(j)\int_0^{2\pi}d\varphi(j)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{P_r(j)\Delta r(j)\right.$$
$$\left.+P_\theta(j)\Delta\theta(j)+P_\varphi(j)\Delta\varphi(j)-\Delta t\bar{K}_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{P}(j),\boldsymbol{Q}(j))\}\right] \tag{3.70}$$

となる．この場合，ハミルトニアンが(3.68)のときは，(3.69)に代わって

$$\bar{K}_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{P},\boldsymbol{Q})=\frac{1}{2m}\left(P_r{}^2+\frac{P_\theta{}^2}{r^2}+\frac{P_\varphi{}^2}{r^2\sin^2\theta}\right)-\frac{\hbar^2}{8mr^2}(1+\mathrm{cosec}^2\theta)+V(r,\theta,\varphi) \tag{3.71}$$

と求まる．こうして求めた $\bar{K}_{\mathrm{eff}}$ は，$(r_{\mathrm{f}}{}^2\sin^2\theta_{\mathrm{f}})^{-1}$ を Feynman 核の $\boldsymbol{Q}_{\mathrm{f}}$ と $\boldsymbol{Q}_{\mathrm{i}}$ にバランスよくふりわけたもので，(3.67)より対称性がよい．実際，このことをみるため，$\alpha=0$ の Weyl 順序*に書きかえてみよう．そのためには，

* Weyl 順序は，(1.35)〜(1.37)の議論からもわかるように (P,Q) の意味での対称性は高い．

$$Q(j) = \bar{Q}(j)+\frac{1}{2}\varDelta Q(j)$$

と書いて，置き換え則を用いればよい．明らかに(3.69)は形を変えるが，(3.71)は不変である．つまり，(3.71)は中点処方によるハミルトニアンそのものである．

最後に，こうして得られたカミルトニアン(3.69)は，

$$\begin{aligned}&\frac{1}{r^2\sin\theta}K_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{P},\boldsymbol{Q})e^{i[P_r(r-r')+P_\theta(\theta-\theta')+P_\varphi(\varphi-\varphi')]/\hbar}\\&\quad=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r,\theta,\varphi)\right)\frac{1}{r^2\sin\theta}e^{i[P_r(r-r')+P_\theta(\theta-\theta')+P_\varphi(\varphi-\varphi')]/\hbar}\end{aligned}\tag{3.72}$$

と書けることに注意しよう．ただし，Δ は極座標で書いたラプラシアン

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cot\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

である．

こうして，経路積分における正準変換の手法により，無限小正準変換とそれに対応する演算子変換は理解でき，また，点正準変換を行なうことで，たとえば極座標の経路積分表示を得ることができた．極座標での量子力学(3.53)は許されなかったのに，経路積分では許された理由は，それが Schrödinger 方程式の表現であり，Schrödinger 方程式のレベルでは，Descartes 座標から極座標への変換は自由に行なえるという事実を反映している．

しかし，われわれの処方は

$$\begin{aligned}&F_1(q,Q) = -\frac{m\omega}{2}q^2\tan Q \qquad \left(p=\frac{\partial F_1}{\partial q},\ P=\frac{\partial F_1}{\partial Q}\right)\\&p = -\sqrt{2m\omega P}\sin Q, \qquad q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\cos Q\end{aligned}\tag{3.73}$$

という正準変換に関しては，P も Q も有限領域しか動かないことより，置き換え則(3.32)，(3.33)が使えないためにカミルトニアンの変数の時間の足をそろえることができず，うまく扱えない．こうした古典論において位相空間が有

限である場合は，われわれの手法は使えない*．しかし，(p, q) 表示をはなれ，3-4 節で導入する表示にもとづく経路積分では，(3.73)で変換されたハミルトニアン

$$K = \omega P \qquad (P \geqq 0,\ 0 \leqq Q < 2\pi) \tag{3.74}$$

も議論できるようになる．

3-2 拘束系

前節での変数変換の議論により，Descartes 座標以外への経路積分表式の拡張を試みたが，座標の一部が動かない場合——たとえば，球面上に拘束された力学系——には何の処方も与えない．ここでは，こうした拘束系の経路積分表示について議論しよう．

拘束系の一般論は面倒なものであり，ほかにも解説があるので**そちらにゆずることにし，ここではもっぱら具体例で話を進めることにして，半径 ρ の球面上に拘束された場合を考えよう．

$$\begin{aligned} L &= \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2 - \frac{\lambda}{2}(\boldsymbol{x}^2 - \rho^2) \\ \boldsymbol{x} &\equiv (x^1, x^2, x^3, \cdots, x^{D+1}) \end{aligned} \tag{3.75}$$

ここで，λ は Lagrange の未定定数である．運動方程式は

$$\begin{aligned} m\ddot{\boldsymbol{x}} - \lambda \boldsymbol{x} &= 0 \\ \boldsymbol{x}^2 &= \rho^2 \end{aligned} \tag{3.76}$$

である．下側の式より，運動が球面上に制限されることは明らかで，それを時間微分して得られる

$$\dot{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{x} = 0$$

に注意して，(3.76)の上側の式と $\dot{\boldsymbol{x}}$ の内積をとることにより $\dot{\boldsymbol{x}}^2$ は定数となる．それを

* 点変換のときは，運動量空間が無限領域であったから置き換え則が使えた．

** 大貫義郎：解析力学，物理テキストシリーズ 2（岩波書店，1987）157 ページ．

$$\dot{\boldsymbol{x}}^2 \equiv \rho^2 c \qquad (c：定数)$$

とおく．これより $\boldsymbol{x}$ の軌道が求まる．最後に(3.76)の上側の式と $\boldsymbol{x}$ との内積を考えると，

$$\lambda = \frac{m}{\rho^2}\boldsymbol{x}\cdot\ddot{\boldsymbol{x}} = -\frac{m}{\rho^2}\dot{\boldsymbol{x}}^2 = -mc$$

のように λ が求まる．

さて，(3.75)の正準形式を Dirac の考えに従って議論しよう．これは基本的には，ラグランジアンにあらわれるすべての変数は力学変数と考えるというもので，いまの場合，時間微分を含まない λ も力学変数と思うのである．正準運動量は

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} = m\dot{\boldsymbol{x}}$$

であるが，λ の正準運動量は，(3.75)が $\dot{\lambda}$ を含まないので，

$$p_\lambda = \frac{\partial L}{\partial \dot{\lambda}} = 0 \tag{3.77}$$

となってしまう．Dirac は，(3.77)を拘束条件とみなし，このように，ラグランジアンからただちに得られるそれを**1次拘束**(primary constraint)とよんだ．ハミルトニアンは，

$$\begin{aligned} H &= \boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{x}} + p_\lambda\dot{\lambda} - L \\ &= \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + \frac{\lambda}{2}(\boldsymbol{x}^2 - \rho^2) \end{aligned}$$

であるが，少し一般化する．それは，(3.77)の1次拘束を

$$\phi_1 = p_\lambda \ (=0) \tag{3.78}$$

と書いて，Lagrange の未定定数 v を用いて，

$$H_T = H + v\phi_1 \tag{3.79}$$

をハミルトニアンとして採用するものだ．拘束はすべての時刻で成り立たねばならないので，Poisson 括弧を

$$\{A, B\}_{\mathrm{P}} \equiv \sum_{k=1}^{D+1} \frac{\partial A}{\partial x^k} \frac{\partial B}{\partial p_k} + \frac{\partial A}{\partial \lambda} \frac{\partial B}{\partial p_\lambda} - (A \leftrightarrow B) \tag{3.80}$$

で定義して，時間変化の式

$$\dot{A} = \{A, H_T\}_{\mathrm{P}} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

に代入すると，

$$\dot{\phi}_1 = \{\phi_1, H\}_{\mathrm{P}} = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^2 - \rho^2)$$

となる．これは，ゼロにならなければならない．こうした条件を，**整合性の条件**(consistency condition)とよぶ．整合性の条件により出現する新たな拘束を**2次拘束**(secondary constraint)といって，いまは

$$\phi_2 \equiv \boldsymbol{x}^2 - \rho^2 \ (=0) \tag{3.81}$$

である．これに対しても整合性の条件，

$$\dot{\phi}_2 = \{\phi_2, H_T\}_{\mathrm{P}} = \frac{2}{m} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p}$$

より，新たな2次拘束

$$\phi_3 \equiv \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} \ (=0) \tag{3.82}$$

の必要性が生じる．同様のプロセスをふんで，

$$\dot{\phi}_3 = \{\phi_3, H_T\}_{\mathrm{P}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{m} - \lambda \boldsymbol{x}^2$$

より，

$$\phi_4 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{m} - \lambda \boldsymbol{x}^2 \ (=0) \tag{3.83}$$

が得られる．これ以上，新たな2次拘束は生じない．というのは，ϕ_4 に対する整合性の条件は，

$$\dot{\phi}_4 = \{\phi_4, H_T\}_{\mathrm{P}} = -4\frac{\lambda}{m} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} - v \boldsymbol{x}^2 = 0$$

となって，v を決める式となるからである．v が決まればこうしたプロセスは

終わる．

われわれの見つけ出した4つの拘束，ϕ_1((3.78)式)，ϕ_2((3.81)式)，ϕ_3((3.82)式)，ϕ_4((3.83)式)の間の Poisson 括弧は，

$$\{\phi_a, \phi_b\}_{\mathrm{P}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \boldsymbol{x}^2 \\ 0 & 0 & 2\boldsymbol{x}^2 & \dfrac{4}{m}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} \\ 0 & -2\boldsymbol{x}^2 & 0 & 2\left(\lambda\boldsymbol{x}^2+\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{m}\right) \\ -\boldsymbol{x}^2 & -\dfrac{4}{m}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} & -2\left(\lambda\boldsymbol{x}^2+\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{m}\right) & 0 \end{pmatrix} \tag{3.84}$$

であり(反対称行列であることに注意)，

$$\det\{\phi_a, \phi_b\}_{\mathrm{P}} = 4(\boldsymbol{x}^2)^4 \neq 0$$

もわかる．

さて，こうして作りあげた正準形式が，Euler-Lagrange 方程式(3.76)と一致するためには，もう一工夫必要である．というのは，位相空間は広げてしまっているし，拘束条件もいまのところ何も用いていないからである．4つの拘束を解いて，残った位相空間の座標をとり出して議論ができればそれでよいが，一般にはむずかしい．(われわれの例では，もちろん極座標をとればよいのだが，いまは一般的に議論する．)

Dirac は，Poisson 括弧と同じ代数関係

$$\{A, B\}_{\mathrm{D}} = -\{B, A\}_{\mathrm{D}}, \qquad \{AB, C\}_{\mathrm{D}} = A\{B, C\}_{\mathrm{D}} + \{A, C\}_{\mathrm{D}}B$$
$$\{A, \{B, C\}_{\mathrm{D}}\}_{\mathrm{D}} + \{B, \{C, A\}_{\mathrm{D}}\}_{\mathrm{D}} + \{C, \{A, B\}_{\mathrm{D}}\}_{\mathrm{D}} = 0$$

をみたす次の量

$$\begin{aligned} \{A, B\}_{\mathrm{D}} &\equiv \{A, B\}_{\mathrm{P}} - \sum_{a,b}\{A, \phi_a\}_{\mathrm{P}} C_{ab} \{\phi_b, B\}_{\mathrm{P}} \\ C_{ab} &\equiv \{\phi_a, \phi_b\}_{\mathrm{P}}^{-1} \end{aligned} \tag{3.85}$$

を導入した．ここで，C_{ab} は行列(3.84)の逆行列であり，$\det\{\ ,\ \}_{\mathrm{P}} \neq 0$ のため，

$$C_{ab}=\begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{\left(\lambda \boldsymbol{x}^2+\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{m}\right)}{(\boldsymbol{x}^2)^2} & \dfrac{2}{m}\dfrac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}}{(\boldsymbol{x}^2)^2} & -\dfrac{1}{\boldsymbol{x}^2} \\ \dfrac{\lambda \boldsymbol{x}^2+\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{m}}{(\boldsymbol{x}^2)^2} & 0 & -\dfrac{1}{2\boldsymbol{x}^2} & 0 \\ -\dfrac{2}{m}\dfrac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}}{(\boldsymbol{x}^2)^2} & \dfrac{1}{2\boldsymbol{x}^2} & 0 & 0 \\ \dfrac{1}{\boldsymbol{x}^2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.86}$$

とその存在が保障されている．(3.85)を**Dirac 括弧**とよぶ．彼が Dirac 括弧を考案した理由は，A として拘束 ϕ_a を採用すると，任意の B に対して，

$$\{\phi_a, B\}_{\mathrm{D}}=\{\phi_a, B\}_{\mathrm{P}}-\sum_{b,c}\{\phi_a,\phi_b\}_{\mathrm{P}}C_{b,c}\{\phi_c, B\}_{\mathrm{P}}=0$$

が成り立つことにより，Dirac 括弧を用いるかぎりは拘束をゼロにしてよいということからであった．つまり，Dirac 括弧を導入することは，拘束条件を解いたことと同様の結果になるのである．

実際に，運動方程式を調べてみよう．(3.85)と(3.86)より，

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\{\boldsymbol{x}, H\}_{\mathrm{D}}=\frac{\boldsymbol{p}}{m}$$

$$\dot{\boldsymbol{p}}=\{\boldsymbol{p}, H\}_{\mathrm{D}}=-\lambda\boldsymbol{x}$$

$$\dot{\lambda}=\{\lambda, H\}_{\mathrm{D}}=0$$

とここまでは，Poisson 括弧の計算と同じであるが，Dirac 括弧の導入により，$P_\lambda=0$ であるから力学変数としてはこれだけでよいことになる．上式は，明らかに(3.76)と同等である．

正準交換関係は，

$$\{x_i, p_j\}_{\mathrm{D}}=\delta_{ij}-\frac{x_i x_j}{\boldsymbol{x}^2},\qquad \{x_i, x_j\}_{\mathrm{D}}=0$$
$$\{p_i, p_j\}_{\mathrm{D}}=\frac{1}{\boldsymbol{x}^2}(x_j p_i-x_i p_j) \tag{3.87}$$

となる．

さて，ここで拘束系について少し一般的に考えてみよう．拘束系というのは，正準運動量

$$p_i = \frac{\partial L(\dot{q}, q)}{\partial \dot{q}_i}$$

が，速度 $\dot{q}_i$ について解けない次のような場合，

$$\det\left(\frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}_j}\right) = \det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}\right) = 0$$

をいう．（この意味において，拘束系のことを**特異ラグランジアン**(**singular Lagrangian**)の系とよぶこともある.）上述の例では，$P_\lambda=0$ であったから確かにこの定義にあっている．

そこで，次のような例をみてみよう．ラグランジアンは

$$\begin{aligned} L &= -mc^2\sqrt{\dot{x}^2} \\ \dot{x}^2 &\equiv \sum_{\mu=0}^{3} \frac{dx_\mu}{d\tau}\frac{dx^\mu}{d\tau} = \left(\frac{dx_0}{d\tau}\right)^2 - \frac{1}{c^2}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}\right)^2 \end{aligned} \tag{3.88}$$

($x_0=t$，m は質量，c は光速度）で与えられる．これは相対論的な自由粒子を表わしている．というのは，運動方程式

$$\frac{d}{d\tau}\left(\frac{\dot{x}_\mu}{\sqrt{\dot{x}^2}}\right) = 0$$

がパラメータ τ のとりかえ，$\tau \to f(\tau)$ を行なっても不変であることを利用して，τ を固有時間，$d\tau^2 \equiv (dt)^2 - (d\boldsymbol{x})^2/c^2$ とみなすことにより，

$$\frac{d}{d\tau}(\dot{x}_\mu) = 0, \qquad \dot{x}^2 = 1$$

が得られるからである．こうした，パラメータのとりかえに対する不変性は，特異ラグランジアンを一般に導く．

この系の正準形式を考えてみよう．正準運動量

$$p^\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu} = \frac{-mc^2}{\sqrt{\dot{x}^2}}\dot{x}^\mu \tag{3.89}$$

は，$\dot{x}_\mu$ について解けない．

$$\det\left(\frac{\partial p^\mu}{\partial \dot{x}^\nu}\right) = \det\left[-\frac{mc^2}{\sqrt{\dot{x}^2}}\left(\delta_\nu{}^\mu - \frac{\dot{x}^\mu \dot{x}_\nu}{\dot{x}^2}\right)\right] = 0$$

そこで，1次拘束として，(3.89)を2乗して得られる関係

$$\phi = p^2 - m^2c^4 \qquad (p^2 \equiv p^\mu p_\mu) \tag{3.90}$$

を採用しよう．ハミルトニアンは

$$H = p^\mu \dot{x}_\mu - L = 0$$

であるから，全ハミルトニアンは前と同様に，未定定数 v を用いて

$$H_T = v\phi$$

となる．以前の例と異なるところは，整合性の条件

$$\dot{\phi} = \{\phi, H_T\}_\mathrm{P} = 0$$

がみたされており，しかし v は決まらないという事情である．このような拘束は，**第1種拘束**(first-class constraint)とよばれ，前例のように v が決まる拘束は，**第2種拘束**(second-class constraint)とよばれる．こうした第1種拘束が生じる理由は，先に述べた，理論がパラメータ τ のとり方によらないことによる．作用

$$S = -mc^2 \int \sqrt{\dot{x}^2} d\tau$$

でいうと，これがパラメータ τ のとりかえで不変であることより，第1種拘束が生じたのである．

v を決めるには，こうしたパラメータ τ をどこかに止めてしまう条件をつければよさそうである．それを，たとえば，χ(カイ)-条件とよび，いまは($\tau = x_0$ とするため)

$$\chi = x_0 - \tau \tag{3.91}$$

とする．Poisson 括弧は，

$$\{\chi, \phi\}_\mathrm{P} = 2p^0 = \pm 2\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4} \neq 0 \tag{3.92}$$

であるから，χ の整合性の条件によって v は決まる．つまり，χ の導入によりいまや，第1種拘束は第2種拘束となったのである．少し見通しをよくするた

め，正準変換 $(x_\mu, p^\mu) \to (X_\mu, P^\mu)$ を行なって，

$$\begin{aligned} X_0 &= x_0 - \tau \\ X_k &= x_k, \qquad P^\mu = p^\mu \end{aligned} \tag{3.93}$$

としよう．この時の母関数は3-1節の議論を思い出すと，

$$F_3(p^\mu, X_\mu) \equiv -p^\mu X_\mu - p^0 \tau$$

で，カミルトニアンは，F_3 が陽に“時間 τ”によっているので，

$$K = -\frac{\partial F_3}{\partial \tau} = p^0 = P^0 \tag{3.94}$$

となる．Dirac 括弧では，$X_0=0$，$P^0=\sqrt{\boldsymbol{P}^2+m^2c^4}$（(3.92)の真中の式で上側の符号をとった）として，時間発展は，

$$\dot{X}_k = \{X_k, K\}_\mathrm{D} = \frac{P_k}{P^0}, \qquad \dot{P}_k = \{P_k, K\}_\mathrm{D} = 0$$

が求まる．これは，はじめから $\tau = x_0$ とおいて出発したラグランジアン

$$L = -mc^2\sqrt{1-\frac{\dot{\boldsymbol{x}}^2}{c^2}} \tag{3.95}$$

で，そのハミルトニアン

$$H = c\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2c^2} \tag{3.96}$$

より生成されるハミルトンの運動方程式

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x}, H\}_\mathrm{P} = \frac{\boldsymbol{p}}{H}, \qquad \dot{\boldsymbol{p}} = \{\boldsymbol{p}, H\}_\mathrm{P} = 0$$

と一致している．

こうして，拘束系では(第1種拘束の場合は適当な χ-条件を導入して) Dirac 括弧を用いることで運動方程式が導かれることがわかった．量子化に際しては，Dirac は

$$\{A, B\}_\mathrm{D} \to \frac{1}{i\hbar}[A, B]$$

を対応原理的に導入した．以下では，経路積分でこうした拘束系を議論してみよう．

まず，Faddeev と Senjanovic により導入された拘束系の経路積分公式(**FS 経路積分公式**)

$$\langle\phi_{\rm f}|e^{-iTH/\hbar}|\phi_{\rm i}\rangle \equiv \int D\mu\phi_{\rm f}^*(q_{\rm f})\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{-T/2}^{T/2}dt(p\dot{q}-H(p,q))\right]\phi_{\rm i}(q_{\rm i}) \tag{3.97}$$

$$D\mu \equiv \prod_a \delta(\phi_a)|\det\{\phi_a,\phi_b\}_{\rm P}|^{1/2}DpDq$$

の議論からはじめよう．ここで，ϕ_a は拘束条件で，第1種拘束のときは，χ-条件を設定してすべて，第2種拘束にしたものと考える．彼らは以下に述べるような筋道に従って，(3.97)を作り上げた．

まず，(i) すべての拘束が適当な座軸系の導入により解けたとする．その結果，部分空間 $\Gamma^*\equiv\{p^*,q^*\}$ が得られる．少し説明が必要であろう．いま，拘束は第2種であるので

$$\{\phi_a,\phi_b\}_{\rm P}\equiv A_{ab},\qquad \det A_{ab}\neq 0 \tag{3.98}$$

である．a,b は拘束の数だけ存在するが，A_{ab} が反対称行列で，行列式がゼロでないことにより a,b の次元は必ず偶数次元である(前述の例からも，わかるだろう)．そこで，やりたいことは変数変換によって，(3.98)を

$$\{\phi_a',\phi_b'\}_{\rm P}=\begin{pmatrix}0 & -\boldsymbol{I}\\ \boldsymbol{I} & 0\end{pmatrix}\equiv J_{ab} \tag{3.99}$$

としたいということである．というのは，もし(3.99)が得られれば，

$$\phi_a'=(q_1,q_2,\cdots,q_m,p_1,p_2,\cdots,p_m) \tag{3.100}$$

ととれて，全体の空間 $\Gamma\equiv(q_1,q_2,\cdots,q_m,q_{m+1},\cdots,q_n,p_1,p_2,\cdots,p_m,p_{m+1},\cdots,p_n)$ の中から，(3.100)をおとして，$\Gamma^*\equiv(q_{m+1},\cdots,q_n,p_{m+1},\cdots,p_n)$ を得ることができるからである．ところで，代数学より“任意の正則(逆行列をもつ)行列 A に対して，

$$\Lambda A\Lambda^{\rm T}=\begin{pmatrix}0 & -\boldsymbol{I}\\ \boldsymbol{I} & 0\end{pmatrix} \tag{3.101}$$

という正則行列 Λ が存在する”* ことがわかっている．これを用いれば，

---

* 田坂隆士：2次形式 II，岩波講座「基礎数学」，線型代数 iii (岩波書店，1976) 141 ページの系 1.

(3.98)に Λ をかけて,

$$\begin{aligned}\{\phi_a, \phi_b\}_{\mathrm{P}} \Lambda_{a'a} \Lambda_{b'b} &= \Lambda_{a'a} A_{ab} (\Lambda^{\mathrm{T}})_{bb'} \\ &= J_{a'b'}\end{aligned} \tag{3.102}$$

とできる．左辺は，Λ を Poisson 括弧の中に入れると

$$\{(\Lambda\phi)_a, (\Lambda\phi)_b\}_{\mathrm{P}} + (\phi_a \text{ に比例する項}) = J_{ab} \tag{3.103}$$

となり，Γ^* の空間中では，ϕ_a に比例する項はおとせるので,

$$\phi_a{}' = \Lambda_{ab}\phi_b \tag{3.104}$$

ととればよいことがわかる．

そこで，まず Γ^* での経路積分表示があったとしよう．$\Gamma^* \equiv (p^*, q^*)$ で書く．

$$\langle \psi_{\mathrm{f}} | e^{-iTH/\hbar} | \psi_{\mathrm{i}} \rangle = \int Dp^* Dq^* \psi_{\mathrm{f}}{}^*(q_{\mathrm{f}}{}^*) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{-T/2}^{T/2} dt (p^*\dot{q}^* - H^*(p^*, q^*))\right] \psi_{\mathrm{i}}(q_{\mathrm{i}}{}^*) \tag{3.105}$$

ここで,

$$H^*(p^*, q^*) = H(p, q)|_{\Gamma^*}$$

である．(ii) (3.105)に，(3.100)の $\phi_a{}'$ を δ 関数で入れて，全体の位相空間での積分表式,

$$(3.105) = \int DpDq \prod_a \delta(\phi_a{}') \psi_{\mathrm{f}}{}^*(q_{\mathrm{f}}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{-T/2}^{T/2} dt (p\dot{q} - H(p, q))\right] \psi_{\mathrm{i}}(q_{\mathrm{i}})$$

を作る．(iii) (3.104)の変数変換を代入すると,

$$(3.105) = \int DpDq \prod_a \delta(\phi_a) |\det \Lambda_{ab}|^{-1} \psi_{\mathrm{f}}{}^*(q_{\mathrm{f}}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{-T/2}^{T/2} dt (p\dot{q} - H(p, q))\right] \psi_{\mathrm{i}}(q_{\mathrm{i}})$$

となる．ここで δ 関数の性質

$$\delta(af(x)) = \frac{1}{|a|}\delta(f(x))$$

を使った．一方,

$$|\det \Lambda_{ab}|^{-1} = |\det \{\phi_a, \phi_b\}_{\mathrm{P}}|^{1/2} \tag{3.106}$$

であることに注意すれば，FS 経路積分公式(3.97)が求まる．(3.106)を導こう．(3.99)より

$$\det J_{ab} = 1$$

であるから，(3.102)で両辺の行列式をとることにより

$$(\det \Lambda_{ab})^2(\det \{\phi_a, \phi_b\}_{\mathrm{P}}) = 1$$

が得られる．

こうした導入の過程での問題点を考えてみよう．まず，(i)での経路積分表示の存在の問題である．前節でも議論したように Γ^* での量子力学は，一般に自己共役演算子ではない正準運動量 p を含むことになり，通常の方法では(3.105)の経路積分公式は得られない．

わずかに(3.105)が正当化されるのは，Descartes 座標で与えられた場合，すなわち，たとえば $2n$ 次元の位相空間での経路積分公式を，$2(n-m)$ 次元でのそれに書き換えるという場合くらいであり，前節での極座標の公式(3.67)で $P_r=0$，$r=1$ として球面の経路積分公式であるといってよいのか，まったくわからない．さらに，すべての議論は連続表示で行なわれており，演算子順序などのきちんとした反映は望めない．

こうした問題を踏まえて FS 積分公式を調べていこう．そのために，(3.75)で定義される球面上に拘束された力学系を例にとろう．

きちんとした議論をするためには，いまの場合の FS 経路積分公式(3.97)を，差分形で与えなければならないが，その際 ϕ_3 が $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}$ という量子論での非可換演算子の積であることを考慮して，(1.39)の記法(α-順序)

$$\boldsymbol{x}^{(\alpha)}(j) \equiv \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\boldsymbol{x}(j)+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\boldsymbol{x}(j-1) \tag{3.107}$$

を導入して，

$$\phi_3(j) = \boldsymbol{p}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)}$$

と書く．その他の $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{x}(j)$ として，

$$\{\phi_a(j),\phi_b(j)\}_{\mathrm{P}}=$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \boldsymbol{x}(j)^2 \\ 0 & 0 & 2\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)} & 4\boldsymbol{p}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)/m \\ 0 & -2\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)} & 0 & \begin{matrix}(1-2\alpha)\boldsymbol{p}(j)^2/m \\ +2\lambda(j)\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)}\end{matrix} \\ -\boldsymbol{x}(j)^2 & -4\boldsymbol{p}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)/m & \begin{matrix}-(1-2\alpha)\boldsymbol{p}(j)^2/m \\ -2\lambda(j)\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)}\end{matrix} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\det\{\phi_a(j),\phi_b(j)\}_{\mathrm{P}}=4(\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)})^2(\boldsymbol{x}(j)^2)^2$$

であることを用いると,

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|e^{-iTH/\hbar}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle=\lim_{N\to\infty}\prod_{j=0}^{N}\int d^{D+1}\boldsymbol{x}(j)d\lambda(j)\delta(\boldsymbol{x}(j)^2-\rho^2)\delta(\lambda(j)\boldsymbol{x}(j)^2-\boldsymbol{p}(j)^2/m)$$

$$\times\prod_{j=1}^{N}\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}(j)dP_\lambda(j)}{(2\pi\hbar)^D}\delta(\boldsymbol{p}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)})\delta(P_\lambda(j))(\boldsymbol{x}(j)^2)(2\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)})$$

$$\times\psi_{\mathrm{f}}^*(\boldsymbol{x}(N))\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\boldsymbol{p}(j)\cdot\varDelta\boldsymbol{x}(j)-\frac{\varDelta t}{2m}\boldsymbol{p}(j)^2\right\}\right]\psi_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x}(0))$$

が得られ, λ と P_λ の積分を行なうと,

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|e^{-iTH/\hbar}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle=\lim_{N\to\infty}\prod_{j=0}^{N}\int d^{D+1}\boldsymbol{x}(j)\delta(\boldsymbol{x}(j)^2-\rho^2)\prod_{j=1}^{N}\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}(j)}{(2\pi\hbar)^D}$$

$$\times\delta(\boldsymbol{p}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)})(2\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{x}(j)^{(\alpha)})\psi_{\mathrm{f}}^*(\boldsymbol{x}(N))\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\boldsymbol{p}(j)\cdot\varDelta\boldsymbol{x}(j)\right.\right.$$

$$\left.\left.-\frac{\varDelta t}{2m}\boldsymbol{p}(j)^2\right\}\right]\psi_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x}(0)) \tag{3.108}$$

となり, これをわれわれの出発点としよう. ($\boldsymbol{x}(j)$ の j についての積分が, $\boldsymbol{p}(j)$ より 1 つ多いのは, Feynman 核(1.45)で両端 $\boldsymbol{q}_{\mathrm{f}},\boldsymbol{q}_{\mathrm{i}}$ の積分が波動関数を導入した結果必要となったからであり, p の $(D+1)$ 次元積分の分母が $(2\pi\hbar)^D$ であるのは, 物理的空間 Γ^* がいまの場合 $2D$ 次元であるからである.)

(3.108)で $T=0$ の場合を調べよう.

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle=\int d^{D+1}\boldsymbol{x}d^{D+1}\boldsymbol{x}'\delta(\boldsymbol{x}^2-\rho^2)\delta(\boldsymbol{x}'^2-\rho^2)\psi_{\mathrm{f}}^*(\boldsymbol{x})(2\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}^{(\alpha)})\psi_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x}')$$

$$\times\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\delta(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}^{(\alpha)})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\varDelta\boldsymbol{x}/\hbar} \tag{3.109}$$

ここで，$\boldsymbol{x}(N)\to\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}(0)\to\boldsymbol{x}'$ とし，

$$\Delta\boldsymbol{x} \equiv \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', \qquad \boldsymbol{x}^{(\alpha)} \equiv \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\boldsymbol{x}+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\boldsymbol{x}' \tag{3.110}$$

と書いた．議論をさきに進めるためには，D 次元球面

$$\boldsymbol{x}^2 = \rho^2$$

について少し調べておかねばならない．極座標

$$\begin{aligned}
x^1 &= r\cos\theta^D \\
x^2 &= r\sin\theta^D\cos\theta^{D-1} \\
x^3 &= r\sin\theta^D\sin\theta^{D-1}\cos\theta^{D-2} \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
x^D &= r\sin\theta^D\sin\theta^{D-1}\sin\theta^{D-2}\cdots\sin\theta^2\cos\theta^1 \\
x^{D+1} &= r\sin\theta^D\sin\theta^{D-1}\sin\theta^{D-2}\cdots\sin\theta^2\sin\theta^1
\end{aligned} \tag{3.111}$$

$$0\leqq\theta^1<2\pi, \qquad 0\leqq\theta^j<\pi \quad (j\geqq 2)$$

を用いると，D 次元球面は，

$$r = \rho$$

である．$(D+1)$次元のラプラシアンは，

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}^2} = \Delta_r - \frac{\boldsymbol{L}^{(D)2}}{r^2} \tag{3.112}$$

と書ける．ここに

$$\Delta_r \equiv (r)^{-D}\frac{\partial}{\partial r}\left((r)^D\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{3.113}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^{(D)2} &\equiv -g^{-1/2}\sum_{i,j=1}^{D}\frac{\partial}{\partial\theta^i}\left(g^{ij}g^{1/2}\frac{\partial}{\partial\theta^j}\right) \\
&= -(\sin\theta^D)^{-D+1}\frac{\partial}{\partial\theta^D}\left[(\sin\theta^D)^{D-1}\frac{\partial}{\partial\theta^D}\right]+(\sin\theta^D)^{-2}\boldsymbol{L}^{(D-1)2}
\end{aligned} \tag{3.114}$$

である．ただし，g_{ij} は D 次元球の計量テンソル(g^{ij} はその逆行列)

$$g_{ij} = \delta_{ij}(\sin\theta^D\sin\theta^{D-1}\cdots\sin\theta^{j+1})^2 \tag{3.115}$$

g はその行列式

$$g = \det g_{ij} = [(\sin\theta^D)^{D-1}(\sin\theta^{D-1})^{D-2}\cdots(\sin\theta^3)^2(\sin\theta^2)]^2 \qquad (3.116)$$

である．(3.114)の演算子は，球面上のラプラシアンと考えることができ，次の固有値方程式に従う．

$$\boldsymbol{L}^{(D)2}S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta}) = l_D(l_D+D-1)S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta}) \qquad (3.117)$$

ここに，$S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta})$ は D 次元球面調和関数

$$S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta}) \equiv \sqrt{(2)^{2l_{D-1}+D-2}\left(l_D+\frac{D-1}{2}\right)(l_D-l_{D-1})!/\pi(l_D+l_{D-1}+D-2)!}$$
$$\times\Gamma\left(l_{D-1}+\frac{D-1}{2}\right)(\sin\theta^D)^{l_{D-1}}C_{l_D-l_{D-1}}{}^{l_{D-1}+(D-1)/2}(\cos\theta^D)S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D-1)}(\boldsymbol{\theta}) \qquad (3.118)$$

$$S_{l_1}{}^{(1)}(\theta^1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il_1\theta^1}$$

である．(3.118)で，$\Gamma(x)$ はガンマ関数，$C_l{}^m(x)$ は Gegenbauer の多項式，l_j は

$$-l_2 \leqq l_1 \leqq l_2 \leqq l_3 \leqq \cdots \leqq l_D < \infty \qquad (l_j \geqq 0,\ j \geqq 2)$$

に従うとしている*．$S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta})$ は，完全性の条件

$$\sum_{l_D=0}^{\infty}\sum_{l_{D-1}=0}^{l_D}\sum_{l_{D-2}=0}^{l_{D-1}}\cdots\sum_{l_2=0}^{l_3}\sum_{l_1=-l_2}^{l_2}S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta})S_{\boldsymbol{l}}{}^{(D)*}(\boldsymbol{\theta}')$$
$$\equiv \delta^D(\cos\Theta^{(D)}-1) \equiv g^{-1/2}\delta(\theta^D-\theta'^D)\cdots\delta(\theta^1-\theta'^1) \qquad (3.119)$$

をみたす．ここで

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}' \equiv \rho^2\cos\Theta^{(D)} = \rho^2(\cos\theta^D\cos\theta'^D+\sin\theta^D\sin\theta'^D\cos\Theta^{(D-1)}) \qquad (3.120)$$

であり，(3.119)の下側の式を**球面 $\boldsymbol{\delta}$ 関数**という．

さて以上の準備の下，(3.109)での積分

$$\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\delta(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}^{(\alpha)})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\Delta\boldsymbol{x}/\hbar} \qquad (3.121)$$

を評価してみよう．$\boldsymbol{p}$ を次のように $\boldsymbol{x}^{(\alpha)}$ に平行な成分と垂直な成分に分ける．

* $D=1$ のとき，$-\infty<l_1<\infty$ となる．

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_{/\!/} + \boldsymbol{p}_{\perp}$$
$$(\boldsymbol{p}_{/\!/})_a \equiv \frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}^{(\alpha)})}{(\boldsymbol{x}^{(\alpha)})^2} x_a{}^{(\alpha)} \tag{3.122}$$
$$(\boldsymbol{p}_{\perp})_a \equiv \Pi_{ab}(\boldsymbol{x}^{(\alpha)})\boldsymbol{p}_b$$

ただし,

$$\Pi_{ab}(\boldsymbol{x}) \equiv \delta_{ab} - \frac{x_a x_b}{\boldsymbol{x}^2} \tag{3.123}$$

は射影演算子であり,

$$\Pi_{ab}(\boldsymbol{x})\Pi_{bc}(\boldsymbol{x}) = \Pi_{ac}(\boldsymbol{x}) \tag{3.124}$$

をみたす．これらより,

$$\delta(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}^{(\alpha)}) = \frac{1}{|\boldsymbol{x}^{(\alpha)}|}\delta(|\boldsymbol{p}_{/\!/}|)$$

となり，$|\boldsymbol{p}_{/\!/}| = p_{/\!/}$ 積分を行なうことができて，さらに残りの $\boldsymbol{p}$ 積分を行なって,

$$(3.121) = \frac{1}{|\boldsymbol{x}^{(\alpha)}|}\int \frac{d^D\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D} e^{i\boldsymbol{p}_{\perp}\cdot\Delta\boldsymbol{x}/\hbar}$$
$$= \frac{1}{|\boldsymbol{x}^{(\alpha)}|}\delta^D(\Delta\boldsymbol{x}_{\perp})$$

となる．ただし,

$$(\Delta\boldsymbol{x}_{\perp})_a \equiv \Pi_{ab}(\boldsymbol{x}^{(\alpha)})\Delta x_b$$

である．(3.123)を代入して，$\Delta\boldsymbol{x}_{\perp} = 0$ の解をさがすと,

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}' \qquad (\alpha=0 \text{ のとき}) \tag{3.125}$$
$$\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{x}' \quad \text{または} \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}' \qquad (\alpha\neq 0 \text{ のとき}) \tag{3.126}$$

であることがわかる．これより，$\alpha\neq 0$ の場合は，$\boldsymbol{x}$ が $\boldsymbol{x}'$ と反平行である場合も解になる．つまり，球面上の原点を北極にとると，南極も何の相互作用もないのに許されることになり，これは排除しなければならない．こうして，$\alpha=0$ の Weyl 順序だけが，球面上の経路積分を記述することがわかった．

(3.125)は，(3.120)を考慮すれば

$$\cos\Theta^{(D)} = 1$$

を意味するので，結局

$$\bar{\boldsymbol{x}} \equiv \frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'}{2} \tag{3.127}$$

と書いて

$$\rho^{D+1}\int \frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\delta(\boldsymbol{p}\cdot\bar{\boldsymbol{x}})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\Delta\boldsymbol{x}/\hbar} = \delta^D(\cos\Theta^{(D)}-1) = \sum_l S_l{}^{(D)}(\boldsymbol{\theta})S_l{}^{(D)*}(\boldsymbol{\theta}') \tag{3.128}$$

という球面上の完全性の条件が得られる．((3.128)は，一番右の表式の和で与えられる完全性の条件が，δ 関数を利用した連続の積分表示で書けるということを表わしている．) (3.128)を用いれば，(3.109)は($\alpha=0$ として)

$$\langle\psi_{\rm f}|\psi_{\rm i}\rangle = \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\,\delta(\boldsymbol{x}^2-\rho^2)\psi_{\rm f}{}^*(\boldsymbol{x})\psi_{\rm i}(\boldsymbol{x}) \tag{3.129}$$

という，球面上の内積を定めるそれらしい式になる．

次に，任意の演算子 $\hat{\mathcal{O}}(\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{x}})$ の期待値を計算してみよう．

$$\begin{aligned}\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle \equiv \langle\varphi|\hat{\mathcal{O}}(\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{x}})|\psi\rangle &\equiv \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\,d^{D+1}\boldsymbol{x}'\delta(\boldsymbol{x}^2-\rho^2)\delta(\boldsymbol{x}'^2-\rho^2)\\ &\times(2\boldsymbol{x}\cdot\bar{\boldsymbol{x}})\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\delta(\boldsymbol{p}\cdot\bar{\boldsymbol{x}})\varphi^*(\boldsymbol{x})\mathcal{O}(\boldsymbol{p},\bar{\boldsymbol{x}})\psi(\boldsymbol{x}')e^{i\boldsymbol{p}\cdot\Delta\boldsymbol{x}/\hbar}\end{aligned} \tag{3.130}$$

ここに，演算子であることを明記するため，記号 ^ をつけ，後の目的のため，波動関数は φ,ψ と書いた．Weyl 順序のため，$\mathcal{O}$ の $\boldsymbol{x}$ も $\bar{\boldsymbol{x}}$ と書くことに注意しよう．変数を $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ から $(\Delta\boldsymbol{x},\bar{\boldsymbol{x}})$ へと変換し(ヤコビアンは1である)

$$\begin{aligned}\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle &= \int d^{D+1}\bar{\boldsymbol{x}}\,d^{D+1}\Delta\boldsymbol{x}\,\bar{\boldsymbol{x}}^2\delta\left(\bar{\boldsymbol{x}}^2+\frac{\Delta\boldsymbol{x}^2}{4}-\rho^2\right)\delta(\bar{\boldsymbol{x}}\cdot\Delta\boldsymbol{x})\varphi^*\left(\bar{\boldsymbol{x}}+\frac{\Delta\boldsymbol{x}}{2}\right)\psi\left(\bar{\boldsymbol{x}}-\frac{\Delta\boldsymbol{x}}{2}\right)\\ &\times\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\delta(\boldsymbol{p}\cdot\bar{\boldsymbol{x}})\mathcal{O}(\boldsymbol{p},\bar{\boldsymbol{x}})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\Delta\boldsymbol{x}/\hbar}\end{aligned} \tag{3.131}$$

が得られる．$\boldsymbol{p}$ 積分を前と同様に，$\bar{\boldsymbol{x}}$ に平行と垂直の成分に分解して遂行し，$\bar{\boldsymbol{x}}\to\boldsymbol{x}$，$\Delta\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{y}$ と書いて

$$(3.131) = \int d^{D+1}\boldsymbol{x}d^{D+1}\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^2\delta\left(\boldsymbol{x}^2+\frac{\boldsymbol{y}^2}{4}-\rho^2\right)\delta(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y})\varphi^*\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{y}}{2}\right)$$
$$\times\psi\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{y}}{2}\right)\mathcal{O}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{y}_\perp},\boldsymbol{x}\right)\frac{1}{|\boldsymbol{x}|}\delta^D(\boldsymbol{y}_\perp)$$

となる．ただし，

$$\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{y}_\perp}\right)_a \equiv \Pi_{ab}(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial y_b} \tag{3.132}$$

と変形し，

$$\delta(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}) = \frac{1}{|\boldsymbol{x}|}\delta(|\boldsymbol{y}_{/\!/}|)$$

$$\delta^D(\boldsymbol{y}_\perp)\delta(|\boldsymbol{y}_{/\!/}|) = \delta^{D+1}(\boldsymbol{y})$$

を用いると，最終的に，

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\,\mathcal{O}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{y}_\perp},\boldsymbol{x}\right)\left[\delta\left(\boldsymbol{x}^2+\frac{\boldsymbol{y}^2}{4}-\rho^2\right)\varphi^*\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{y}}{2}\right)\psi\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{y}}{2}\right)\right]\Bigg|_{\boldsymbol{y}=0} \tag{3.133}$$

となる．（ここで，$\mathcal{O}$ の中の $\boldsymbol{y}$ 微分をすべてに作用させてから $\boldsymbol{y}=0$ とする.）

いま，(i) $\hat{\mathcal{O}}\equiv f(\hat{\boldsymbol{x}})$ とすれば，

$$\langle f(\hat{\boldsymbol{x}})\rangle = \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\,\delta(\boldsymbol{x}^2-\rho^2)\varphi^*(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.134}$$

(ii) $\hat{\mathcal{O}}\equiv\hat{p}_a$

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}_a\rangle &= \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\,i\hbar\Pi_{ab}(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial y_b}\left[\delta\left(\boldsymbol{x}^2+\frac{\boldsymbol{y}^2}{4}-\rho^2\right)\varphi^*\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{y}}{2}\right)\psi\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{y}}{2}\right)\right]\Bigg|_{\boldsymbol{y}=0}\\ &= \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\,\delta(\boldsymbol{x}^2-\rho^2)\varphi^*(\boldsymbol{x})\left\{-i\hbar\left(\Pi_{ab}(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x_b}-\frac{Dx_a}{2\boldsymbol{x}^2}\right)\right\}\psi(\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{3.135}$$

ただし，1 行目から 2 行目への変形には，

$$x_a\Pi_{ab}(\boldsymbol{x}) = 0, \qquad \frac{\partial\Pi_{ab}}{\partial x_b} = -D\frac{x_a}{\boldsymbol{x}^2} \tag{3.136}$$

を用い，部分積分を行なった．

(iii) $\hat{\mathcal{O}} \equiv \hat{\boldsymbol{p}}^2$

$$\langle \hat{\boldsymbol{p}}^2 \rangle = \int d^{D+1}\boldsymbol{x} \left(i\hbar \Pi_{ab}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial y_b} \right)^2 \left[\delta\left(\boldsymbol{x}^2 + \frac{\boldsymbol{y}^2}{4} - \rho^2 \right) \varphi^*\left(\boldsymbol{x} + \frac{\boldsymbol{y}}{2} \right) \psi\left(\boldsymbol{x} - \frac{\boldsymbol{y}}{2} \right) \right] \Bigg|_{\boldsymbol{y}=0}$$

$$= \int d^{D+1}\boldsymbol{x}\, \delta(\boldsymbol{x}^2 - \rho^2) \varphi^*(\boldsymbol{x}) \left\{ \hbar^2 \left(\frac{\boldsymbol{L}^{(D)2}}{\boldsymbol{x}^2} + \frac{D(D-1)}{4\boldsymbol{x}^2} \right) \right\} \psi(\boldsymbol{x}) \qquad (3.137)$$

ここでは，部分積分を何回か行ない，Π_{ab} の射影演算子としての性質(3.124)ならびに(3.136)

$$\Pi_{ab}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial^2}{\partial x_a \partial x_b} = \frac{D}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^{(D)2}}{r^2}$$

などを用いた．$\boldsymbol{L}^{(D)2}$ は，(3.114)で定義された球面ラプラシアンである．(部分積分の過程で，波動関数の境界条件を全く用いていないことに注意しよう.)

さて，$\alpha=0$ とした(3.108)($\bar{\boldsymbol{x}}(j) \equiv (\boldsymbol{x}(j)+\boldsymbol{x}(j-1))/2$)

$$\langle \psi_{\rm f} | e^{-iT\hat{H}/\hbar} | \psi_{\rm i} \rangle = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=0}^{N} \int d^{D+1}\boldsymbol{x}(j) \delta(\boldsymbol{x}^2(j) - \rho^2) \prod_{j=1}^{N} \int \frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}(j)}{(2\pi\hbar)^D}$$

$$\times \delta(\boldsymbol{p}(j)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(j))(2\boldsymbol{x}(j)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(j)) \psi_{\rm f}^*(\boldsymbol{x}(N)) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left\{ \boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta\boldsymbol{x}(j) \right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{\Delta t}{2m}\boldsymbol{p}^2(j) \right\} \right] \psi_{\rm i}(\boldsymbol{x}(0)) \qquad (3.138)$$

が球面上の経路積分公式であることがわかったわけだが，右辺で定義された左辺の演算子ハミルトニアンを求めよう．左辺を

$$\langle \varphi | e^{-i\Delta t\hat{H}/\hbar} | \psi_{\rm i} \rangle, \qquad \langle \varphi | \equiv \langle \psi_{\rm f} | e^{-i(T-\Delta t)\hat{H}/\hbar}$$

と書き，右辺を

$$\int d^{D+1}\boldsymbol{x}(1) d^{D+1}\boldsymbol{x}(0) \delta(\boldsymbol{x}^2(1) - \rho^2) \delta(\boldsymbol{x}^2(0) - \rho^2) \int \frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}(1)}{(2\pi\hbar)^D} \delta(\boldsymbol{p}(1)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(1))$$

$$\times (2\boldsymbol{x}(1)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(1)) \varphi^*(\boldsymbol{x}(1)) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\boldsymbol{p}(1)\cdot\Delta\boldsymbol{x}(1) - \Delta t \frac{\boldsymbol{p}(1)^2}{2m} \right) \right\} \psi_{\rm i}(\boldsymbol{x}(0))$$

$$\varphi^*(\boldsymbol{x}(1)) \equiv \lim_{N\to\infty} \prod_{j=2}^{N} \left[\int d^{D+1}\boldsymbol{x}(j) \delta(\boldsymbol{x}(j)^2 - \rho^2) \int \frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}(j)}{(2\pi\hbar)^D} \delta(\boldsymbol{p}(j)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(j)) \right.$$

$$\left. \times (2\boldsymbol{x}(j)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(j)) \psi_{\rm f}^*(\boldsymbol{x}(N)) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta\boldsymbol{x}(j) - \frac{\Delta t}{2m}\boldsymbol{p}(j)^2 \right\} \right] \right]$$

と書いて，両辺を $O(\Delta t)$ で比べてみれば，(3.134)と(3.137)の結果より，

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m\rho^2}\left(\boldsymbol{L}^{(D)^2} + \frac{D(D-1)}{4}\right) \tag{3.139}$$

であることがわかる．上記の操作をくりかえして，(3.138)は，

$$(3.138)\text{の左辺} = \lim_{N\to\infty} \langle\psi_{\mathrm{f}}|\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\right)^N|\psi_{\mathrm{i}}\rangle$$

と書けることがわかる．

(3.134)と(3.135)の結果より，交換関係

$$\begin{aligned} &[\hat{x}_a, \hat{x}_b] = 0, \qquad [\hat{x}_a, \hat{p}_b] = i\hbar\Pi_{ab}(\hat{\boldsymbol{x}}) = i\hbar\left(\delta_{ab} - \frac{\hat{x}_a\hat{x}_b}{\hat{\boldsymbol{x}}^2}\right) \\ &[\hat{p}_a, \hat{p}_b] = -i\hbar\frac{\hat{x}_a\hat{p}_b - \hat{x}_b\hat{p}_a}{\hat{\boldsymbol{x}}^2} \end{aligned} \tag{3.140}$$

が求まる．(3.140)は，{(3.87)の Dirac 括弧} $i\hbar$ そのものであり，Dirac の対応原理が示されたことになる．

まとめると，球面上に拘束された力学系は，FS 経路積分公式

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\mathrm{f}}|e^{-iT\hat{H}/\hbar}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle &= \lim_{N\to\infty}\prod_{j=0}^{N}\int d^{D+1}\boldsymbol{x}(j)\delta(\boldsymbol{x}(j)^2-\rho^2)\prod_{j=1}^{N}\int\frac{d^{D+1}\boldsymbol{p}(j)}{(2\pi\hbar)^D} \\ &\times\delta(\boldsymbol{p}(j)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(j))(2\boldsymbol{x}(j)\cdot\bar{\boldsymbol{x}}(j))\psi_{\mathrm{f}}^*(\boldsymbol{x}(N))\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta\boldsymbol{x}(j)\right.\right. \\ &\left.\left.-\frac{\Delta t}{2m}\boldsymbol{p}(j)^2 - \Delta t V(\bar{\boldsymbol{x}}(j))\right\}\right]\psi_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x}(0)) \end{aligned} \tag{3.141}$$

によって，球面上の量子力学として正しく記述されることが理解できた．（ポテンシャル V があっても，(3.83)の ϕ_4 が変わるだけで，p_λ, λ を積分した後には影響はのこらない.）

彼らの作り方に問題点があるにもかかわらず，(3.141)が正しい結果を生みだす理由は以下のようである．(3.139)の演算子ハミルトニアンの固有関数である球面調和関数の完全性(3.119)を，(3.139)の下側の表式にくりかえし用いることで，時間推進の演算子の c 数表示が得られる．そこでの(N 重)和を，(3.128)を用いることで(N 重)積分の形にしたものが(3.141)にほかならない

からである*.

3-3 多重連結空間

FS 経路積分公式(3.141)で，$D=1$ つまり 1 次元円周 S^1 上の場合を考えよう．(3.139)の結果より

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|e^{-iT\hat{H}/\hbar}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle = \lim_{N\to\infty}\langle\psi_{\mathrm{f}}|\left\{1-\frac{i}{\hbar}\Delta t\left(\frac{\hbar^2}{2m\rho^2}\boldsymbol{L}^2+V(\hat{\theta})\right)\right\}^N|\psi_{\mathrm{i}}\rangle \tag{3.142}$$

ただし，$\boldsymbol{L}^2\equiv(\boldsymbol{L}^{(1)})^2$ とし，ポテンシャルは S^1 上で定義されているため，周期条件

$$V(\hat{\theta}+2\pi n) = V(\hat{\theta}) \tag{3.143}$$

をみたすとする．(3.142)を別の表式であらわしてみよう．(3.119)の完全性の条件($l^1\to l$ として)

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} S_l{}^{(1)}(\theta)S_l{}^{(1)*}(\theta') = \delta(\theta-\theta'),\qquad S_l{}^{(1)}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il\theta}$$

を，形式的に

$$S_l{}^{(1)}(\theta) \equiv \langle\theta|l\rangle,\qquad \sum_{l=-\infty}^{\infty}|l\rangle\langle l| = \boldsymbol{I} \tag{3.144}$$

$$\langle\theta|\theta'\rangle = \delta(\theta-\theta'),\qquad \int_{-\pi}^{\pi}d\theta|\theta\rangle\langle\theta| = \boldsymbol{I} \tag{3.145}$$

と書いて，(3.142)に順番に挿入していけば

---

* 最近，さらに進んだ議論が一般の拘束条件，

$$f(\boldsymbol{x}) = 0$$

の場合になされた(T. Kashiwa: Prog. Theor. Phys. **95** (1996) 421)．対称性の高い球面の場合は，$\alpha=0$ の中点処方を 2 次拘束(3.82)に対してとらなければならなかった．しかし一般の場合の 2 次拘束，$\boldsymbol{p}\cdot\nabla f(\boldsymbol{x})=0$，の経路積分中での表式は，

$$\boldsymbol{p}(j)\cdot\left\{\sum_{n=0}\frac{1}{(2n+1)!}\left(\frac{\Delta\boldsymbol{x}(j)\cdot\nabla_{\bar{\boldsymbol{x}}}}{2}\right)^{2n}\right\}\nabla_{\bar{\boldsymbol{x}}}f(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$$

である．球面のときは中点処方に戻るが，このように一般の場合は決して中点のみの関数ではないことがわかる．

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|e^{-iTH/\hbar}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle = \lim_{N\to\infty}\left(\prod_{j=0}^{N}\int_{-\pi}^{\pi}d\theta(j)\right)\prod_{j=1}^{N}\left(\frac{1}{2\pi}\sum_{l(j)=-\infty}^{\infty}\right)\psi_{\mathrm{f}}^{*}(\theta(N))$$
$$\times\exp\left[i\sum_{j=1}^{N}\left\{l(j)(\theta(j)-\theta(j-1))-\frac{\Delta t}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m\rho^2}l(j)^2+V(\theta(j))\right)\right\}\right]\psi_{\mathrm{i}}(\theta(0))$$
$$(3.146)$$

となる．$\psi_{\mathrm{i}}(\theta)\equiv\langle\theta|\psi_{\mathrm{i}}\rangle$ であり，$\boldsymbol{L}^2$ の固有値(3.117)を使った．次の Poisson の和公式

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty}e^{il(\theta-\theta')}f(l) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dp\,e^{ip(\theta-\theta'+2\pi m)}f(p) \qquad (3.147)$$

を使って，(3.146)を

$$(3.146) = \lim_{N\to\infty}\left[\prod_{j=0}^{N}\int_{-\pi}^{\pi}d\theta(j)\right]\prod_{j=1}^{N}\left[\sum_{m(j)=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp(j)}{2\pi}\right]\psi_{\mathrm{f}}^{*}(\theta(N))$$
$$\times\exp\left[i\sum_{j=1}^{N}\left\{p(j)(\theta(j)-\theta(j-1)+2\pi m(j))\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{\Delta t}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m\rho^2}p(j)^2+V(\theta(j))\right)\right\}\right]\psi_{\mathrm{i}}(\theta(0)) \qquad (3.148)$$

と書き換えよう．まず，Poisson 和公式の証明を与えておく．(3.147)の左辺に

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\delta(p-l) = 1$$

を入れて，

$$(3.147)\text{の左辺} = \int_{-\infty}^{\infty}dp\sum_{l=-\infty}^{\infty}\delta(p-l)e^{ip(\theta-\theta')}f(p)$$

とし，δ 関数の Fourier 変換を用い

$$(3.147)\text{の左辺} = \int_{-\infty}^{\infty}dp\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\alpha}{2\pi}\sum_{l=-\infty}^{\infty}e^{i\alpha(p-l)}e^{ip(\theta-\theta')}f(p)$$

と書く．ここで，公式

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty}e^{-i\alpha l} = 2\pi\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(\alpha-2\pi m) \qquad (3.149)$$

に留意すると，α 積分が実行できて(3.147)が導ける*.

さて，(3.148)で変数変換

$$\theta(j)-\theta(j-1)+2\pi m(j) = (\theta(j)+2\pi m'(j))-(\theta(j-1)+2\pi m'(j-1))$$

つまり $m(j)=m'(j)-m'(j-1)$(ただし $m(1)=m'(1)$)を用いて，和を m から m' にとりかえてやると**

$$\begin{aligned}(3.148) = \lim_{N\to\infty}\left[\prod_{j=0}^{N}\int_{-\pi}^{\pi} d\theta(j)\right]\prod_{j=1}^{N}\left[\sum_{m'(j)=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp(j)}{2\pi}\right]\psi_f{}^*(\theta(N))\\ \times\exp\left[i\sum_{j=1}^{N}\left\{p(j)(\theta(j)+2\pi m'(j)-\theta(j-1)-2\pi m'(j-1))\right.\right.\\ \left.\left.-\frac{\Delta t}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m\rho^2}p(j)^2+V(\theta(j))\right)\right\}\right]\psi_i(\theta(0))\end{aligned}$$

となるが，さらに

$$\theta(j)+2\pi m'(j) = \theta'(j) \qquad (j\neq N)$$

と変数変換してやると

$$\begin{aligned}\langle\psi_f|e^{-iT\hat{H}/\hbar}|\psi_i\rangle = \lim_{N\to\infty}\iint_{-\pi}^{\pi} d\theta(N)d\theta(0)\psi_f{}^*(\theta(N))\sum_{m(N)=-\infty}^{\infty}\left[\left(\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp(j)}{2\pi}\right)\right.\\ \left.\times\prod_{j=1}^{N-1}\left(\sum_{m(j)=-\infty}^{\infty}\int_{(2m(j)-1)\pi}^{(2m(j)+1)\pi}d\theta(j)\right)\right]\exp\left[i\sum_{j=1}^{N}\left\{p(j)(\theta(j)+2\pi m(N)\delta_{jN}\right.\right.\\ \left.\left.-\theta(j-1))-\frac{\Delta t}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2 p(j)^2}{2m\rho^2}+V(\theta(j))\right)\right\}\right]\psi_i(\theta(0))\end{aligned}$$

と書ける．(θ', m' のダッシュははずした.)

$$\sum_{m(j)=-\infty}^{\infty}\int_{(2m(j)-1)\pi}^{(2m(j)+1)\pi}d\theta(j) = \int_{-\infty}^{\infty}d\theta(j)$$

に注意し，

$$p(j) \to \hbar^{-1}p(j)$$

とスケール変換すると

---

* 正確には(3.149)が，Poisson 和公式とよばれるものである.

** 逆は，

$$m'(j) = \sum_{k=1}^{j} m(k)$$

と解けるので，この変数変換は許される.

$$\langle\psi_f|e^{-iT\hat{H}/\hbar}|\psi_i\rangle = \lim_{N\to\infty}\iint_{-\pi}^{\pi} d\theta(N)d\theta(0)\psi_f^*(\theta(N)) \sum_{n=-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp(j)}{2\pi\hbar}$$
$$\times\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty} d\theta(j)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{p(j)(\theta(j)-\theta(j-1)+2\pi n\,\delta_{jN})\right.\right.$$
$$\left.\left.-\Delta t\left(\frac{p(j)^2}{2m\rho^2}+V(\theta(j))\right)\right\}\right]\psi_i(\theta(0)) \tag{3.150}$$

が得られる．特に，

$$\psi_f^*(\theta(N)) = \delta(\theta(N)-\theta_f), \qquad \psi_i(\theta(0)) = \delta(\theta(0)-\theta_i)$$

としたFeynman核

$$K(\theta_f, t_f;\theta_i, t_i) = \lim_{N\to\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp(j)}{2\pi\hbar}\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}d\theta(j)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{p(j)\right.\right.$$
$$\left.\left.\times(\theta(j)-\theta(j-1))-\Delta t\left(\frac{p(j)^2}{2m\rho^2}+V(\theta(j))\right)\right\}\right]_{\theta_f=\theta(N)+2\pi n,\,\theta_i=\theta(0)}$$
$$= \lim_{N\to\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{m\rho^2}{2\pi i\hbar\Delta t}}\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{m\rho^2}{2\pi i\hbar\Delta t}}d\theta(j)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m\rho^2}{2\Delta t}\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.\times(\theta(j)-\theta(j-1))^2-\Delta tV(\theta(j))\right\}\right]\right|_{\theta(N)=\theta_f+2\pi n,\,\theta(0)=\theta_i} \tag{3.151}$$

は，通常の1次元運動の表式(1.50)と比べると，($\rho\theta=q$として，) 境界条件$\theta(N)=\theta_f+2\pi n$と，$n$に関する和が入っている以外は同じものである．(ここで(3.151)で1行目から2行目への変換は，$n\to -n$として，境界条件を書き換えた.) このことは，次のようにいうこともできるだろう．われわれの世界は円周S^1上であったから，$\theta_f-\theta_i$と$\theta_f-\theta_i+2\pi n$の区別はつかない．こうした余分の自由度nについて足しあわせれば，求めるS^1上の経路積分表示が得られる．nを**巻き数**(**winding number**)という．

巻き数nがあらわれるのは，S^1が単連結な空間ではなく，多重連結空間であるからで，図3-1のようにθ_iからθ_fへの経路として，さまざまなものが存在することによる．こうした多重連結空間においては，位置を指定するには角度だけでは不十分で，巻き数nも必要なのである．つまり，θではなく，

$$\theta^{(n)} \equiv \theta+2\pi n \tag{3.152}$$

という座標を導入することにより完全に経路の指定ができる．$\theta^{(n)}$で記述され

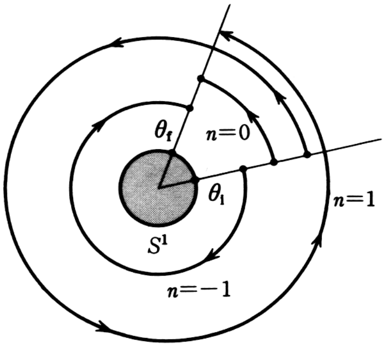


図 3-1 S^1 上の可能な経路.

る空間 $\overline{S^1}$ を**普遍被覆空間**(universal covering space)とよび，この中では経路の記述は1対1であり，単連結な空間である．模式的には，図3-2のように書ける．(こうした普遍被覆空間の例としては，複素関数論で学んだ Riemann 面を思い出せばよい.)

$\overline{S^1}$ での座標を用いると，(3.151)は，

$$K(\theta_f, t_f; \theta_i, t_i) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} K^{(n)}(\theta_f, t_f; \theta_i, t_i) \tag{3.153}$$

$$K^{(n)}(\theta_f, t_f; \theta_i, t_i) \equiv \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m\rho^2}{2\pi i\hbar\Delta t}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m\rho^2}{2\pi i\hbar\Delta t}} d\theta(j) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left\{\frac{m\rho^2}{2\Delta t} \times (\Delta\theta(j))^2 - \Delta t V(\theta(j))\right\}\right]\Bigg|_{\theta(N)=\theta_f^{(n)}, \theta(0)=\theta_i^{(0)}} \tag{3.154}$$

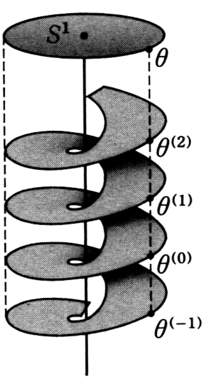


図 3-2 普遍被覆空間 $\overline{S^1}$. S^1 上での θ という点は，$\overline{S^1}$ ではらせん状の異なった面上の点 $\theta^{(n)}$ となる.

と書ける．

こうして得られたS^1上の経路積分表示に対応する演算子形式の量子力学とはどんなものだろうか．少しそれについて議論してみよう．この系では，$\theta^{(n)}$のnは区別してはいけないから，$\theta^{(n)}$そのものを力学変数にはとれない．しかし，$e^{i\theta^{(n)}}=e^{i\theta}$はその候補となりうる．そこで，古典論での

$$\{e^{i\theta}, p\}_{\mathrm{P}} = ie^{i\theta}$$

という Poisson 括弧式の量子化として，

$$\begin{aligned}[\hat{p}, \hat{W}] &= \hbar \hat{W} \\ [\hat{p}, \hat{p}] = [\hat{W}, \hat{W}] &= 0\end{aligned} \tag{3.155}$$

を採用しよう．$\hat{W}$はユニタリー演算子である．

$$\hat{p}|\alpha\rangle = \hbar\alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \tag{3.156}$$

を出発点とし*，(3.155)を用いると

$$|n+\alpha\rangle = (\hat{W})^n|\alpha\rangle$$

$$(\hat{p}|n+\alpha\rangle = \hbar(n+\alpha)|n+\alpha\rangle)$$

が得られる．整数値だけのずれは，$\hat{W}$をかけることで与えられるから，

$$0 \leqq \alpha < 1 \tag{3.157}$$

としてよい．

直交性

$$\langle m+\alpha|n+\alpha\rangle = \delta_{mn}$$

は，$\hat{p}$を行列要素$\langle m+\alpha|\hat{p}|n+\alpha\rangle$で，その自己共役性を用いながら，右と左に作用させることで求まる．こうして定まったαに対して，$|n+\alpha\rangle$($n=0, \pm1, \pm2, \cdots$)の1次結合によって張られる空間を$\mathcal{H}_\alpha$と書こう．このとき，$\mathcal{H}_\alpha$において完全性

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |n+\alpha\rangle\langle n+\alpha| = I \tag{3.158}$$

が成立している．

---

* α-順序のαと区別しよう．ここではα-順序は出てこない．

次に $\hat{W}$ の固有状態を考えよう．$\hat{W}$ はユニタリーであるから

$$\hat{W}|\theta\rangle = e^{i\theta}|\theta\rangle \tag{3.159}$$

という固有値方程式を考えることになる．ここに θ は S^1 上の座標であるから，$\overline{S^1}$ での区別なく，

$$|\theta+2\pi n\rangle = |\theta\rangle \qquad (n=0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{3.160}$$

をみたさねばならない．$|\theta\rangle$ を(3.158)により $|n+\alpha\rangle$ で展開し，(3.159)を用いると，

$$|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+\alpha\rangle \tag{3.161}$$

となる．(実際には $|\theta\rangle$ は規格化できないので，(3.161)の右辺は，微小量 ϵ (>0)を用いて，

$$(3.161)\text{の右辺} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta-\epsilon|n|}|n+\alpha\rangle \tag{3.162}$$

とすべきである.) (3.149)の Poisson 和公式を用いると，直交性

$$\langle\theta'|\theta\rangle = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in(\theta-\theta')} = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(\theta-\theta'+2\pi m) \tag{3.163}$$

が導ける．さらに，

$$\int_a^{a+2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}e^{i(m-n)\theta} = \delta_{mn} \qquad (a\text{ は任意の実数})$$

に注意すると，$\mathscr{H}_\alpha$ における完全性の条件

$$\int_a^{a+2\pi}|\theta\rangle\langle\theta|d\theta = \sum_{n=-\infty}^{\infty}|n+\alpha\rangle\langle n+\alpha| = \boldsymbol{I} \tag{3.164}$$

も導ける．

ハミルトニアンが

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{\theta}) \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{W}^\dagger, \hat{W}) \tag{3.165}$$

で与えられたとすると，完全系(3.164)および(3.158)を用いて，Feynman 核の経路積分表示は，

$$K(\theta_\mathrm{f},T;\theta_\mathrm{i},0)\equiv\langle\theta_\mathrm{f}|e^{-iT\hat{H}/\hbar}|\theta_\mathrm{i}\rangle$$
$$=\lim_{N\to\infty}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_a^{a+2\pi}d\theta(j)\right]\prod_{j=1}^{N}\left[\sum_{l(j)=-\infty}^{\infty}\langle\theta(j)|1-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}(\hat{p},\hat{\theta})|l(j)+\alpha\rangle\right.$$
$$\left.\times\langle l(j)+\alpha|\theta(j-1)\rangle\right]_{\theta(N)=\theta_\mathrm{f},\theta(0)=\theta_\mathrm{i}}$$
$$=\lim_{N\to\infty}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_a^{a+2\pi}d\theta(j)\right]\prod_{j=1}^{N}\left[\frac{1}{2\pi}\sum_{l(j)=-\infty}^{\infty}\exp\left\{il(j)(\theta(j)-\theta(j-1))\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{i}{\hbar}\Delta tH(\hbar(l(j)+\alpha),\theta(j))\right\}\right]\Bigg|_{\theta(N)=\theta_\mathrm{f},\theta(0)=\theta_\mathrm{i}}$$

と書ける．これは，(3.146)とハミルトニアンの運動量が $l(j)+\alpha$ だけ異なったものである．したがって，(3.146)から(3.150)への変形の過程をふたたびたどることで，$\theta_\mathrm{f}^{(n)}\equiv\theta_\mathrm{f}+2\pi n$ と書いて

$$K(\theta_\mathrm{f},T;\theta_\mathrm{i},0)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\lim_{N\to\infty}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}d\theta(j)\right]\left[\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp(j)}{2\pi\hbar}\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\{(p(j)\right.$$
$$\left.+\alpha)\Delta\theta(j)-\Delta tH(p(j),\theta(j))\}\right]_{\theta(N)=\theta_\mathrm{f}^{(n)},\theta(0)=\theta_\mathrm{i}} \tag{3.166}$$

が得られる．α の役割は，(3.166)で指数の肩の和をとると，$e^{i\alpha(\theta_\mathrm{f}-\theta_\mathrm{i})/\hbar}$ が得られることから，1周($\theta_\mathrm{f}-\theta_\mathrm{i}=2\pi$)するごとに波動関数の位相をずらすことになり，これは円周 S^1 の種類を与えるようなものである．α が異なれば，違う S^1 上の量子力学となる*．FS公式は $\alpha=0$ の場合に相当している．

最後に，多重連結空間としての性質が，物理の結果としてあらわに顔を出す1つの例として，Aharonov-Bohm 効果(AB 効果)について議論しよう．くわしい話はほかの文献**にゆずるとして，その概略は以下のようである．電子の運動は，古典的には Lorentz 力 $e\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)+e\dot{\boldsymbol{x}}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)$ で与えられる電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)$ と磁場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)$ によって支配されているが，量子論では，ハミルトニアンが

---

* 以下の AB 効果の，磁束の大きさを表わす量との対比に気づくと，この点はより明確になるだろう((3.192)参照)．

** 河原林研：量子力学(本講座3)や，大貫義郎：物理学最前線9(共立出版，1985)の「アハラノフ・ボーム効果」を参照．

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\right)^2 + e\phi(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.167}$$

のように，ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ やスカラーポテンシャル $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ で与えられることより，Aharonov-Bohm は量子力学の直接的検証として次のような実験を提起した．ソレノイドを用意する．その長さを無限大にすれば両端の磁場の影響はなくなり，ソレノイドの内側の磁場を除けば，外側のいかなるところにも磁場は存在しないようにすることができる(ベクトルポテンシャルは存在している)．ここに電子線を打ち込んで干渉縞を調べる．(ソレノイド内に電子が入らないように，遮蔽しておく.) ソレノイド内の磁場の強弱に応じて，電子の干渉に変化が起きれば，外側に存在するベクトルポテンシャルの存在の確認と量子力学的記述の正当性がわかることになる．干渉縞の起こるこうした現象(いまでは，かなりの精度で確かめられている)を AB 効果という(図 3-3)．

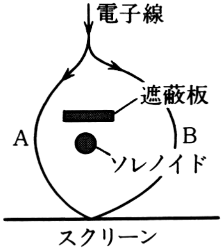


図 3-3 AB 効果．ソレノイドの内側には磁場がある．それを遮蔽してしまい，電子線を打ち込んで A と B の 2 つの経路を通った電子の干渉をスクリーン上で調べる．

AB 効果は，多重連結空間の物理の典型的な例である．仮定より，ソレノイド内部に電子は存在できないのだから，電子の波動関数は，3 次元空間中のソレノイドを抜いた空間 M で定義されている．模式的には，図 3-4 のように，ソレノイドに垂直な平面で切ったとき，その平面は穴のあいたものになる．ここで，電子の通る可能な道筋は，S^1 のとき同様，巻き数 $\boldsymbol{n}$ で特徴づけられる．ソレノイドの中心軸を z 軸とし，対応する平面を x-y 平面としよう．円筒座標を導入すると，空間 M 内の点 $\boldsymbol{x}$ は，

$$\boldsymbol{x} = (r, \theta, z) \qquad (0 \leqq \theta < 2\pi) \tag{3.168}$$

で，r と z の範囲はソレノイドの形によっている．S^1 のときと同様に，普遍被

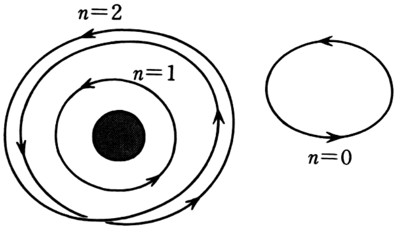


図 3-4 多重連結空間. $n=0$ は1点に縮めることができる.

覆空間 $\bar{M}$ の座標を,

$$\boldsymbol{x}^{(n)} = (\boldsymbol{r}^{(n)}, \boldsymbol{\theta}^{(n)}, \boldsymbol{z}^{(n)}) \tag{3.169}$$

で導入しよう. ただし,

$$\begin{aligned} r^{(n)} &\equiv r, \quad z^{(n)} \equiv z \\ \theta^{(n)} &\equiv \theta + 2\pi n \qquad (0 \leqq \theta < 2\pi,\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \end{aligned} \tag{3.170}$$

である.

ハミルトニアンは, (3.167)のように,

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2 + eV(\boldsymbol{x}) \tag{3.171}$$

であるとしよう. いまは, 静磁場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})$ だけがあるので, $\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}$ で与えられる $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ も時間によらない. スカラーポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ は, ソレノイド内への電子の立ち入りを禁止するために必要である. (つまり, ソレノイド内での値が非常に大きい.)

Euclid 化された Feynman 核

$$\begin{aligned} \tilde{K}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) &\equiv \langle \boldsymbol{x}_\mathrm{f} | e^{-(t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i})H/\hbar} | \boldsymbol{x}_\mathrm{i} \rangle \\ &= \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\boldsymbol{x}(j) \prod_{j=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3\boldsymbol{p}(j)}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left[\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{i\boldsymbol{p}(j)\cdot\Delta\boldsymbol{x}(j)\right.\right. \\ &\qquad \left.\left.\left. - \Delta t\left(\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}(j) - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}(j))\right)^2 + eV(\bar{\boldsymbol{x}}(j))\right)\right\}\right]\right|_{\boldsymbol{x}(N)=\boldsymbol{x}_\mathrm{f},\, \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_\mathrm{i}} \end{aligned}$$

を考えよう($(t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i}) \to i(t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i})$ の解析接続で, 量子力学へはいつでも移ることができる). ここに, (1.75)(で $J, K \to 0$ としたもの)を3次元に拡張し, Weyl 順序をとったので,

$$\Delta \boldsymbol{x}(j) \equiv \boldsymbol{x}(j)-\boldsymbol{x}(j-1), \qquad \bar{\boldsymbol{x}}(j) \equiv \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}(j)+\boldsymbol{x}(j-1)) \tag{3.172}$$

などと書いた．$\boldsymbol{p}(j) \to \boldsymbol{p}(j)+(e/c)\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}(j))$ と変数変換して，$\boldsymbol{p}(j)$ について積分すると，

$$\tilde{K}(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) = \lim_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}\right]^{3N/2}\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty} d^3\boldsymbol{x}(j)\ \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2\Delta t}\right.\right.$$
$$\left.\left.\times(\Delta\boldsymbol{x}(j))^2 - i\frac{e}{c}\Delta\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}(j)) + \Delta t e V(\bar{\boldsymbol{x}}(j))\right\}\right]_{\boldsymbol{x}(N)=\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}},\ \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}} \tag{3.173}$$

となる．$N\to\infty\,(\Delta t\to 0)$ のとき，積分の主要部分は，指数の肩の第1項からで，

$$|\Delta\boldsymbol{x}(j)| \lesssim O(\sqrt{\Delta t}) \tag{3.174}$$

このために，第2項は

$$\Delta\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}(j)) = \int_{\boldsymbol{x}(j-1)}^{\boldsymbol{x}(j)} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} + O((\Delta t)^{3/2}) \tag{3.175}$$

と書ける．これを証明しよう．$\lambda=1$ で $\boldsymbol{x}(j)$，$\lambda=0$ で $\boldsymbol{x}(j-1)$ となるように，

$$\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}(j)+(1-\lambda)\boldsymbol{x}(j-1) = \left(\bar{\boldsymbol{x}}(j)+\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\Delta\boldsymbol{x}(j)\right) \tag{3.176}$$

とパラメータ λ を導入し，

$$\int_{\boldsymbol{x}(j-1)}^{\boldsymbol{x}(j)} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} = \int_0^1 d\lambda\Delta\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{A}\left(\bar{\boldsymbol{x}}(j)+\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\Delta\boldsymbol{x}(j)\right)$$

と書き，右辺を $\Delta\boldsymbol{x}(j)$ で展開して λ 積分を行なうと，$(\lambda-1/2)$ のため $\Delta\boldsymbol{x}(j)$ の2次の項は落ちて，

$$\text{右辺} = \Delta\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}(j)) + O((\Delta\boldsymbol{x})^3)$$

となり，(3.174)を用いると，(3.175)が成り立つ．これで証明は終わる．

(3.175)を利用すれば，

$$\sum_{j=1}^{N}\Delta\boldsymbol{x}(j)\cdot\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}(j)) = \int_l \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} + O(\sqrt{\Delta t}) \tag{3.177}$$

と書ける．右辺の積分は，経路 $l \equiv (\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \to \boldsymbol{x}(1) \to \boldsymbol{x}(2) \to \cdots \to \boldsymbol{x}(N-1) \to \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}})$

に沿って行なう．第2項のオーダーは，和が N 項あり，$N(\Delta t)^{3/2} \sim (\Delta t)^{1/2}$ となることからわかる．こうして，(3.173)は

$$\tilde{K}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \int_{\{l\}} D\boldsymbol{x} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_0[l; \boldsymbol{x}] + \frac{ie}{\hbar c}\int_l \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x}\right]$$

$$D\boldsymbol{x} \equiv \lim_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}\right]^{3N/2} \prod_{j=1}^{N-1} d^3\boldsymbol{x}(j) \tag{3.178}$$

$$S_0[l; \boldsymbol{x}] \equiv \Delta t \sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta \boldsymbol{x}(j)}{\Delta t}\right)^2 + eV(\bar{\boldsymbol{x}}(j))\right\}\bigg|_{\boldsymbol{x}_\mathrm{f}=\boldsymbol{x}(N),\, \boldsymbol{x}_\mathrm{i}=\boldsymbol{x}(0)}$$

となる．ポテンシャル V は，遮蔽内で無限大の値をとるようにしておけば，(3.178)よりそこでは $\tilde{K}\to 0$ となり題意に沿う．

さて以上の準備より実際の計算に移ろう．経路として $\boldsymbol{x}_\mathrm{i}$ から始まり遮蔽のまわりを n 回まわる，$l_n = (\boldsymbol{x}_\mathrm{i}{}^{(0)} \to \boldsymbol{x}(1) \to \cdots \to \boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(n)})$ が効くことは容易に想像できる．以下では，普遍被覆空間 $\bar{M}$ の座標を用いる方がよい．事情は S^1 での(3.151)同様，n についてのすべての和をとって

$$\tilde{K}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{K}^{(n)}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \tag{3.179}$$

$$\tilde{K}^{(n)}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \equiv \int_{\{l_n\}} D\boldsymbol{x} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_0[l_n, \boldsymbol{x}] + \frac{ie}{\hbar c}\int_{l_n} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x}\right]$$

$$S_0[l_n; \boldsymbol{x}] \equiv \Delta t \sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta \boldsymbol{x}(j)}{\Delta t}\right)^2 + eV(\bar{\boldsymbol{x}}(j))\right\}\bigg|_{\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(n)}=\boldsymbol{x}(N),\, \boldsymbol{x}_\mathrm{i}{}^{(0)}=\boldsymbol{x}(0)} \tag{3.180}$$

のようになるはずである($\tilde{K}^{(n)}$ の $\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, \boldsymbol{x}_\mathrm{i}$ に添字を付けないのは，$\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(m+n)}, \boldsymbol{x}_\mathrm{i}{}^{(m)}$ としても $\tilde{K}^{(n)}$ が同じものだからである．以下の議論を見よ)．

$\bar{M}$ は単連結な空間であるから，

$$\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = 0$$

をみたす $\boldsymbol{A}$ として，$F(\boldsymbol{x})$ を $\boldsymbol{x}$ の1価関数としたとき

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \nabla F(\boldsymbol{x}) \qquad (\boldsymbol{x}\in\bar{M}) \tag{3.181}$$

を採用することができる．これより，

$$\int_{\boldsymbol{x}_\mathrm{i}{}^{(0)}}^{\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(0)}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} = F(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(0)}) - F(\boldsymbol{x}_\mathrm{i}{}^{(0)}) \tag{3.182}$$

一方，Stokes の定理は，ソレノイド内の磁束を $\boldsymbol{\Phi}$ として

$$\int_{\boldsymbol{x}^{(m-1)}}^{\boldsymbol{x}^{(m)}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\Phi} \tag{3.183}$$

である．こうして，

$$\int_{l_n} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} = \int_{\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(0)}}^{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(0)}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} + \sum_{m=1}^{n} \int_{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(m-1)}}^{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(m)}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} \tag{3.184}$$

は途中の道筋によらず，(3.182)と(3.183)を用いて，

$$(3.184) = F(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(0)}) - F(\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(0)}) + n\boldsymbol{\Phi} \tag{3.185}$$

と書ける．(3.183)はまた，

$$F(\boldsymbol{x}^{(m)}) - F(\boldsymbol{x}^{(m-1)}) = \boldsymbol{\Phi}$$

と書くこともできるから，(3.170)を思い出し($\boldsymbol{m} \to \boldsymbol{n}$ として)

$$F(\boldsymbol{x}^{(n)}) - \frac{\theta^{(n)}}{2\pi}\boldsymbol{\Phi} = F(\boldsymbol{x}^{(n-1)}) - \frac{\theta^{(n-1)}}{2\pi}\boldsymbol{\Phi}$$

となる．これより，$F(\boldsymbol{x}^{(n)}) - \theta^{(n)}\boldsymbol{\Phi}/2\pi$ は $\boldsymbol{n}$ によらず，定義より $\boldsymbol{M}$ における 1 価関数 $\Lambda(\boldsymbol{x})$ を用いて，

$$F(\boldsymbol{x}^{(n)}) - \frac{\theta^{(n)}}{2\pi}\boldsymbol{\Phi} = \Lambda(\boldsymbol{x}) \tag{3.186}$$

とおくことができる．これを(3.185)に代入すれば

$$\int_{l_n} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x} = n\boldsymbol{\Phi} + \frac{\boldsymbol{\Phi}}{2\pi}(\theta_{\mathrm{f}}^{(0)} - \theta_{\mathrm{i}}^{(0)}) + \Lambda(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}) - \Lambda(\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}) \tag{3.187}$$

となる．

始点と終点を $\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(0)} \to \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(m)}$，$\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(n)} \to \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(m+n)}$ としたとき，

$$\int_{\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(m)}}^{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(m+n)}} \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x} = \int_{\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(0)}}^{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(n)}} \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x} - \int_{\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}^{(0)}}^{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(m)}} \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x} + \int_{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(n)}}^{\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}^{(m+n)}} \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x}$$

と書き換えれば，Stokes の定理(3.183)により第 2 項と第 3 項は打ち消しあって，上述の場合とまったく同じになる．一方，(3.180)の $S_0[l_n, \boldsymbol{x}]$ は，これらのシフトに関して不変である．(ポテンシャル V は定義より不変，$(\Delta\boldsymbol{x}(j))^2$ 項は差の関数だから，共通の巻き数 $\boldsymbol{m}$ は消去できる.) したがって $\tilde{K}^{(n)}$ も不変

となる．(3.180)で $\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}$ に添字を付けなかったのはこうした理由からである．

(3.187)を(3.180)に用いると，(3.179)は

$$\tilde{K}(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) = \exp\left[i\left\{\frac{e\Phi}{2\pi\hbar c}(\theta_{\mathrm{f}}{}^{(0)} - \theta_{\mathrm{i}}{}^{(0)}) + \frac{e}{\hbar c}(\Lambda(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}) - \Lambda(\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}))\right\}\right] \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(ne/\hbar c)\Phi} \tilde{K}_0{}^{(n)}(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) \tag{3.188}$$

となり，$\boldsymbol{A}$ をもはや含まない．ただし

$$\tilde{K}_0{}^{(n)}(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) \equiv \int_{\{l_n\}} D\boldsymbol{x} \exp\left[\frac{-1}{\hbar} S_0[l_n, \boldsymbol{x}]\right] \tag{3.189}$$

である．慣用上

$$\alpha \equiv -\frac{e\Phi}{2\pi\hbar c} \tag{3.190}$$

と書くことにする．

解析接続して，通常の Feynman 核にもどすと，それは

$$\psi(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}) = \int d^3\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} K(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) \psi(\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) \tag{3.191}$$

として意味をもっているので，

$$e^{-(ie/\hbar c)\Lambda(\boldsymbol{x})} \psi(\boldsymbol{x}, t) = \psi'(\boldsymbol{x}, t)$$

で新しい波動関数を導入すれば(これをゲージ変換とよぶ*)，結局，(3.188)で $\Lambda(\boldsymbol{x})$ が消えて，

$$\tilde{K}(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) = e^{-i\alpha(\theta_{\mathrm{f}}{}^{(0)} - \theta_{\mathrm{i}}{}^{(0)})} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2\pi n\alpha i} \tilde{K}_0{}^{(n)}(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) \tag{3.192}$$

と書けることになる．通常の Feynman 核に関しても，解析接続して，～を取り去ったまったく同じ式が成立する．したがって，物理の解釈はこちらのほうで行なうことにする．

いくつかの注意をしよう．(3.192)の左辺は，$\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}$ と $\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}$ についての 1 価関数

---

* つまり，われわれは以下では $\Lambda=0$ となるゲージをとったことになる．

である．$\boldsymbol{x}_\mathrm{f}$ が遮蔽のまわりを 1 周してもとにもどる過程を考えよう．このとき，$\boldsymbol{x}_\mathrm{f}$ の動きに伴い $\theta_\mathrm{f}\to\theta_\mathrm{f}+2\pi$ となるが，$\bar{M}$ での $\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(n)}$ も $\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(n)}\to\boldsymbol{x}_\mathrm{f}{}^{(n+1)}$ と対応して動く．したがって，(3.192)の右辺は，

$$e^{-i\alpha(\theta_\mathrm{f}{}^{(0)}-\theta_\mathrm{i}{}^{(0)})}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-2\pi(n+1)\alpha i}\tilde{K}_0{}^{(n+1)}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f},t_\mathrm{f};\boldsymbol{x}_\mathrm{i},t_\mathrm{i})$$

となり，明らかに(3.192)と同じものである．$\boldsymbol{x}_\mathrm{i}$ についても同様である．

Feynman 核でみたとき，$\boldsymbol{x}_\mathrm{f},\boldsymbol{x}_\mathrm{i}$ に関する 1 価性は(3.191)に注意すると，波動関数の 1 価性を示している．これは大事なことで，もし 1 価性の条件がないと，(3.171)から出発して経路積分表示(3.173)に到達する過程で，

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|d^3\boldsymbol{x}=\boldsymbol{I}$$

という完全系の条件が使えなくなる．というのは，多価の波動関数を許すということは，$\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle=\psi(\boldsymbol{x})$ で定められる値は一意的でなく，それを指定するためには他のラベルが必要となるからである．しかし，いまはその心配はなく，首尾一貫した取り扱いとなっている．実際，$\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}$ の正準交換関係を基礎におく理論では，$\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}$ の演算子としての性質は(ユニタリー同値なものを除いて)一意的に決定し，多価を指定するためのラベルの入る余地がないのである．

次に，α の代わりに $\alpha+m$(整数)としたときの影響を見よう．そのときの Feynman 核を $K_m(\boldsymbol{x}_\mathrm{f},t_\mathrm{f};\boldsymbol{x}_\mathrm{i},t_\mathrm{i})$ と書くと，(3.192)より

$$K_m(\boldsymbol{x}_\mathrm{f},t_\mathrm{f};\boldsymbol{x}_\mathrm{i},t_\mathrm{i})=e^{-im(\theta_\mathrm{f}-\theta_\mathrm{i})}K(\boldsymbol{x}_\mathrm{f},t_\mathrm{f};\boldsymbol{x}_\mathrm{i},t_\mathrm{i})$$

である．(3.192)と(3.191)より，α を $\alpha+m$ とした波動関数 $\psi_m(\boldsymbol{x},t)$ と，もとの波動関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ の関係は

$$\psi_m(\boldsymbol{x},t)=e^{-im\theta}\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{3.193}$$

である(ψ_m も 1 価関数である*)．さて，いまの興味は

$$\left|\int d^3\boldsymbol{x}_\mathrm{i}K_m(\boldsymbol{x}_\mathrm{f},t_\mathrm{f};\boldsymbol{x}_\mathrm{i},t_\mathrm{i})\psi(\boldsymbol{x}_\mathrm{i},t_\mathrm{i})\right|^2 \tag{3.194}$$

---

* $e^{-im\theta}$ は $\boldsymbol{x}=0$ で特異性をもつが，ソレノイドが有限の大きさをもち，かつ遮蔽があるため $\boldsymbol{x}=0$ の近傍では $\psi=0$ となり，この特異性は影響をもたらさない．

が m に依存するかどうかである．初期状態の電子の波束はソレノイドから十分隔たっているとしよう．すなわち，その距離を R とし，波束の広がりを d として，$d/R \ll 1$ であるとしよう．したがって θ 方向の広がり（$|\theta|=d/R$）は無視できるので，こうした波束に対しては

$$\psi_m(\boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \psi(\boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \tag{3.195}$$

が成り立っているから，(3.194)に代入して

$$\begin{aligned}(3.194) &= \left|\int d^3\boldsymbol{x}_\mathrm{i} K_m(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i})\psi_m(\boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i})\right|^2 \\ &= \left|\int d^3\boldsymbol{x}_\mathrm{i} K(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i})\psi(\boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i})\right|^2 = |\psi(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{i})|^2 \end{aligned} \tag{3.196}$$

となる．2 行目へは(3.193)とその上の関係を考慮した．こうして $\alpha \to \alpha+m$ へ変化させても，系には何の変化も起きないことがわかった．特に，α が整数であれば，その影響はまったくみえない（$\alpha+m=0$ とできる）．

$\alpha \neq$ 整数 のとき，われわれは AB 効果をみることになる．実際，(3.189)と(3.180)の S_0 のかたちより

$$\tilde{K}_0{}^{(n)}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) > 0$$

であるから，対応する Feynman 核は，すべての n について

$$K_0{}^{(n)}(\boldsymbol{x}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{x}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \neq 0$$

これより，$\boldsymbol{x}_\mathrm{f}$ での電子の波動関数は α に依存することになって，AB 効果があらわれる．

(3.194)にならって，

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{x}, t) = e^{i\alpha\theta}\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

とおくと，α の θ 依存性は(3.192)より消え去って AB 効果もなくなるように思えるが，実はこうして定義された $\psi_\alpha(\boldsymbol{x}, t)$ は多価であり，したがってこれを量子力学での正しい波動関数とみなすことはできない．

別の言い方をすると，波動関数が 1 価であって $e^{i\alpha\theta}$ のような振舞いをするには，必然的に(3.179)，(3.192)のような n についての和が入らなければならないことになる．

3-4 スピンの経路積分表示と周期的コヒーレント状態

演算子形式を経路積分表示に書きかえるには，いままで完全性の条件(1.14)，(1.15)をみたす $|p\rangle$, $|q\rangle$ や，“単位の分解”(1.89)，(1.123)，(1.128)を満足するBose系やFermi系のコヒーレント状態を利用してきた．こうしたことから，ある与えられた演算子の組((P, Q)とか$(a^\dagger, a)$)に対する経路積分表示を作りあげるには，完全性を示す単位の分解式が成立するような状態があれば十分であることがわかる(このとき，直交性は必ずしも必要でない)．

この節では，スピン系と調和振動子に関して，**“周期的コヒーレント状態 (periodic coherent state)”** なるものを導入して，経路積分公式を作る．

スピン演算子の組，J_i $(i=1,2,3)$

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \qquad (3.197)$$

を考えよう(ϵ_{ijk} は，$\epsilon_{123}=1$ でどの足の入れかえについても符号を変える記号である)．量子力学の角運動量の理論で学んだように，(3.197)の表現は以下を満足する $|j;m\rangle$ で与えられる．

$$\begin{aligned} J_3|j;m\rangle &= \hbar m|j;m\rangle \\ J_\pm|j;m\rangle &= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j;m\pm 1\rangle \\ \boldsymbol{J}^2|j;m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j;m\rangle \qquad (j\geqq m\geqq -j) \end{aligned} \qquad (3.198)$$

ただし

$$J_\pm \equiv J_1 \pm iJ_2 \qquad (3.199)$$

$$\boldsymbol{J}^2 \equiv {J_1}^2+{J_2}^2+{J_3}^2 \qquad (3.200)$$

これは，決められた j に対して，直交性

$$\langle j;m'|j;m\rangle = \delta_{m'm} \qquad (3.201)$$

および完全性

$$\sum_{m=-j}^{j} |j;m\rangle\langle j;m| = \boldsymbol{I} \qquad (3.202)$$

をみたす．以下では，j が決まっているので $|j;m\rangle \equiv |m\rangle$ と書く．

$$|\varphi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-j}^{j} e^{-i(m+\delta)\varphi} |m\rangle \tag{3.203}$$

なる状態を考えよう．ここで

$$\delta = \begin{cases} 0 & (j\text{が整数のとき}) \\ \dfrac{1}{2} & (j\text{が半整数のとき}) \end{cases} \tag{3.204}$$

であるとする．δのために，周期性

$$|\varphi+2\pi n\rangle = |\varphi\rangle \qquad (n\text{：整数})$$

がみたされていることに注意する．$|\varphi\rangle$が“単位の分解”

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi |\varphi\rangle\langle\varphi| = \boldsymbol{I} \tag{3.205}$$

を満足することは，以下のようにすればわかる．

$$(3.205)\text{の左辺} = \frac{1}{2\pi} \sum_{m,m'=-j}^{j} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi} |m\rangle\langle m'|$$

$$= \sum_{m=-j}^{j} |m\rangle\langle m| = \boldsymbol{I}$$

ここで，m, m'がともに整数または半整数について成り立つ

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi} = \delta_{mm'} \tag{3.206}$$

と(3.202)を使った．この状態$|\varphi\rangle$を，“単位の分解”と周期性をみたすという意味において“周期的コヒーレント状態”とよぼう．

経路積分公式を作りあげるためのいくつかの準備をしよう．まず，j_1, j_2がともに整数または半整数のとき

$$\sum_{m=j_1}^{j_2} e^{im\varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{j_1-\epsilon}^{j_2+\epsilon} dp\, e^{ip(\varphi+2\pi m)+i\delta 2\pi m} \qquad (0<\epsilon<1) \tag{3.207}$$

という関係式を証明する．そのため，公式*

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2\pi m\epsilon}}{2\pi m+\varphi} = \frac{e^{i(1/2-\epsilon)\varphi}}{2\sin\dfrac{\varphi}{2}} \qquad (0<\epsilon<1) \tag{3.208}$$

---

* I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik: *Tables of Integrals and Products* (Academic Press, 1980) 1.445, 5 and 6.

に注意する．(3.207)の右辺で p 積分を行なうと

$$(3.207)\text{の右辺} = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\left[\frac{e^{i(j_2+\epsilon)\varphi}e^{i2\pi m\epsilon}}{i(2\pi m+\varphi)}-\frac{e^{i(j_1-\epsilon)\varphi}e^{-i2\pi m\epsilon}}{i(2\pi m+\varphi)}\right]$$

ここで，$j_i\pm\delta=$整数$(i=1,2)$であるから，$e^{i(j_i\pm\delta)2\pi m}=1$ とした．公式(3.208)は

$$(3.207)\text{の右辺} = \frac{e^{i(j_2+1/2)\varphi}-e^{i(j_1-1/2)\varphi}}{2i\sin\dfrac{\varphi}{2}} = (3.207)\text{の左辺}$$

であることを教えてくれる．証明終わり．

次に行列要素を計算する．

$$\langle\varphi'|\varphi\rangle = \frac{1}{2\pi}\sum_{m=-j}^{j} e^{i(m+\delta)(\varphi'-\varphi)} \tag{3.209}$$

$$\langle\varphi'|J_3|\varphi\rangle = \frac{\hbar}{2\pi}\sum_{m=-j}^{j} e^{i(m+\delta)(\varphi'-\varphi)}m \tag{3.210}$$

$$\begin{aligned}\langle\varphi'|J_+|\varphi\rangle &= \frac{\hbar}{2\pi}\sum_{m=-j}^{j} e^{i(m+1+\delta)(\varphi'-\varphi)}e^{i\varphi}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\\ &= \frac{\hbar}{2\pi}\sum_{m=-j}^{j-1} e^{i(m+1+\delta)(\varphi'-\varphi)}e^{i\varphi}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\end{aligned} \tag{3.211}$$

ここで，$m=j$ の項は $\sqrt{j-m}$ のために和から落した．また

$$\begin{aligned}\langle\varphi'|J_-|\varphi\rangle &= \frac{\hbar}{2\pi}\sum_{m=-j}^{j} e^{i(m-1+\delta)(\varphi'-\varphi)}e^{-i\varphi}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\\ &= \frac{\hbar}{2\pi}\sum_{m=-j+1}^{j} e^{i(m-1+\delta)(\varphi'-\varphi)}e^{-i\varphi}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\end{aligned} \tag{3.212}$$

ここでも，$m=-j$ の項を和から落した．これらに，(3.207)の両辺に $f(-i\partial/\partial\varphi)$ を作用させて得られる一般的な関係

$$\sum_{m=j_1}^{j_2} e^{im\varphi}f(m) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_{j_1-\epsilon}^{j_2+\epsilon} dp\, e^{ip(\varphi+2\pi m)+i\delta 2\pi m}f(p) \tag{3.213}$$

を使うと，

$$|\varphi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-j}^{j} e^{-i(m+\delta)\varphi} |m\rangle \tag{3.203}$$

なる状態を考えよう．ここで

$$\delta = \begin{cases} 0 & (j\text{が整数のとき}) \\ \dfrac{1}{2} & (j\text{が半整数のとき}) \end{cases} \tag{3.204}$$

であるとする．δのために，周期性

$$|\varphi+2\pi n\rangle = |\varphi\rangle \qquad (n : \text{整数})$$

がみたされていることに注意する．$|\varphi\rangle$が“単位の分解”

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi |\varphi\rangle\langle\varphi| = \boldsymbol{I} \tag{3.205}$$

を満足することは，以下のようにすればわかる．

$$(3.205)\text{の左辺} = \frac{1}{2\pi} \sum_{m,m'=-j}^{j} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi} |m\rangle\langle m'|$$

$$= \sum_{m=-j}^{j} |m\rangle\langle m| = \boldsymbol{I}$$

ここで，m, m'がともに整数または半整数について成り立つ

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi} = \delta_{mm'} \tag{3.206}$$

と(3.202)を使った．この状態$|\varphi\rangle$を，“単位の分解”と周期性をみたすという意味において“周期的コヒーレント状態”とよぼう．

経路積分公式を作りあげるためのいくつかの準備をしよう．まず，j_1, j_2がともに整数または半整数のとき

$$\sum_{m=j_1}^{j_2} e^{im\varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{j_1-\epsilon}^{j_2+\epsilon} dp\, e^{ip(\varphi+2\pi m)+i\delta 2\pi m} \qquad (0<\epsilon<1) \tag{3.207}$$

という関係式を証明する．そのため，公式*

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2\pi m\epsilon}}{2\pi m+\varphi} = \frac{e^{i(1/2-\epsilon)\varphi}}{2\sin\dfrac{\varphi}{2}} \qquad (0<\epsilon<1) \tag{3.208}$$

---

* I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik: *Tables of Integrals and Products* (Academic Press, 1980) 1.445, 5 and 6.

$$\langle\varphi_\mathrm{f}|e^{-iTH(t)/\hbar}|\varphi_\mathrm{i}\rangle=\lim_{N\to\infty}\langle\varphi_\mathrm{f}|\left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta tH(t)\right)^N|\varphi_\mathrm{i}\rangle$$

$$=\lim_{N\to\infty}\prod_{k=1}^{N}\left[\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi(k)\int_{-\lambda}^{\lambda}\frac{dp(k)}{2\pi}\sum_{m_k=-\infty}^{\infty}\right]\langle\varphi_\mathrm{f}|\varphi_N\rangle\exp\left[i\sum_{k=1}^{N}\{(p(k)+\delta)\right.$$

$$\times(\varphi(k)-\varphi(k-1)+2\pi m_k)-\Delta t(h_+(k)e^{-i(\varphi(k)+\varphi(k-1)+2\pi m_k)/2}\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}$$

$$\left.\left.+h_-(k)e^{i(\varphi(k)+\varphi(k-1)+2\pi m_k)/2}\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}+h_3(k)p(k))\}\right]\right|_{\varphi(0)=\varphi_\mathrm{i}}$$

となる．いつものように $\boldsymbol{h}(k)\equiv\boldsymbol{h}(t_k)$ と書いた．ここに，前節で行なったと同様の変数変換((3.149)から(3.150)へ至る)

$$m_k=m_k'-m_{k-1}',\qquad m_1=m_1'$$

$$\varphi(k)+2\pi m_k'=\varphi'(k)\qquad(k\neq N)$$

によって，周期性 $|\varphi+2\pi m\rangle=|\varphi\rangle$ および

$$\frac{1}{2}(\varphi(k)+\varphi(k-1)+2\pi m_k)=\frac{1}{2}(\varphi(k)+2\pi m_k'+\varphi(k-1)$$

$$+2\pi m_{k-1}')-2\pi m_{k-1}'$$

すなわち

$$e^{\pm i(\varphi(k)+\varphi(k-1)+2\pi m_k)/2}=e^{\pm i(\varphi'(k)+\varphi'(k-1))/2}$$

に注意しながら($\varphi'(k)\to\varphi(k)$ とふたたび書いて)変形して

$$\langle\varphi_\mathrm{f}|e^{-iTH/\hbar}|\varphi_\mathrm{i}\rangle=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{2\pi}\sum_{m=-j}^{j}e^{i(m+\delta)(\varphi_\mathrm{f}-\varphi(N))}\prod_{k=1}^{N}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varphi(k)}{2\pi}\int_{-\lambda}^{\lambda}dp(k)\right]$$

$$\times\exp\left[i\sum_{k=1}^{N}\{(p(k)+\delta)(\varphi(k)-\varphi(k-1))-\Delta t(h_+(k)e^{-i(\varphi(k)+\varphi(k-1))/2}\right.$$

$$\left.\left.\times\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}+h_-(k)e^{i(\varphi(k)+\varphi(k-1))/2}\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}+h_3(k)p(k))\}\right]\right|_{\varphi(0)=\varphi_\mathrm{i}}\tag{3.218}$$

が得られる．ここに，前と同様に和を用いることで $\varphi(k)$ の積分領域を $-\infty$ から $+\infty$ へとすることができる．最後にのこった和は，

$$\sum_{m=-j}^{j}e^{i(m+\delta)(\varphi_\mathrm{f}-\varphi(N))}\to\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{im(\varphi_\mathrm{f}-\varphi(N))}$$

とすることができ，経路積分公式

$$\langle\varphi_f|e^{-iTH/\hbar}|\varphi_i\rangle=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{im(\varphi_f-\varphi(N))}\prod_{k=1}^{N}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varphi(k)}{2\pi}\int_{-\lambda}^{\lambda}dp(k)\right]$$
$$\times\exp\left[i\sum_{k=1}^{N}\{(p(k)+\delta)\Delta\varphi(k)-\Delta t(h_+(k)e^{-i\bar{\varphi}(k)}\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}\right.$$
$$\left.\left.+h_-(k)e^{-i\bar{\varphi}(k)}\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}+h_3(k)p(k))\}\right]\right|_{\varphi(0)=\varphi_i} \tag{3.219}$$
$$=\lim_{N\to\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[\prod_{k=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}d\varphi(k)\right]\left[\prod_{k=1}^{N}\int_{-\lambda}^{\lambda}\frac{dp(k)}{2\pi}\right]\exp\left[i\sum_{k=1}^{N}\{(p(k)+\delta)\Delta\varphi(k)\right.$$
$$-\Delta t(h_1(k)\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}\cos\bar{\varphi}(k)+h_2(k)\sqrt{\lambda^2-p(k)^2}\sin\bar{\varphi}(k)$$
$$\left.\left.+h_3(k)p(k))\}\right]\right|_{\varphi(N)=\varphi_f+2\pi n,\,\varphi(0)=\varphi_i}$$

ができあがる．下側の表式では，Poisson 和公式(3.149)を用い，$d\varphi(N)$ について，積分した．(3.219)が(3.218)と等しいことは，以下のことよりわかる．座標軸を適当に回転して，3 軸方向だけに外場 ($\tilde{h}_3$) のある場合を考える．

$$(3.219)\to\lim_{N\to\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{im(\varphi_f-\varphi(N))}\prod_{k=1}^{N}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varphi(k)}{2\pi}\int_{-\lambda}^{\lambda}dp(k)\right]$$
$$\times\exp\left.\left[i\sum_{k=1}^{N}\{(p(k)+\delta)\Delta\varphi(k)-\Delta t\tilde{h}_3(k)p(k)\}\right]\right|_{\varphi(0)=\varphi_i}$$

ここで，$\Delta\varphi(k)=\omega(k)$ ($\sum_{k=1}^{N}\omega(k)=\varphi(N)-\varphi_i$)とおいて $\omega(k)$ での積分に変換し，積分すると

$$(3.219)\to\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{im(\varphi_f-\varphi_i)}\prod_{k=1}^{N}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega(k)}{2\pi}\int_{-\lambda}^{\lambda}dp(k)\right]$$
$$\times\exp\left.\left[i\sum_{k=1}^{N}\{(p(k)+\delta-m)\omega(k)-\Delta t\tilde{h}_3(k)p(k)\}\right]\right|_{\varphi(0)=\varphi_i}$$
$$=\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{im(\varphi_f-\varphi_i)}\left[\prod_{k=1}^{N}\int_{-\lambda}^{\lambda}dp(k)\delta(p(k)+\delta-m)e^{-i\Delta t\tilde{h}_3(k)p(k)}\right]$$

となって，p の積分範囲のために m の和は有限のところまでしか効かず，(3.218)と一致する．スピンの経路積分公式(3.219)を**Nielsen-Rohrlich の公式**という．結果について少し分析してみよう．

古典論で

$$J_1 \equiv \sqrt{\lambda^2-p^2}\cos\varphi, \qquad J_2 \equiv \sqrt{\lambda^2-p^2}\sin\varphi, \qquad J_3 \equiv p \tag{3.220}$$

とおいて，$\{\varphi, p\}_{\mathrm{P}}=1$，$\{\varphi,\varphi\}_{\mathrm{P}}=\{p,p\}_{\mathrm{P}}=0$ を用いると，

$$\{J_i, J_j\}_{\mathrm{P}} = \epsilon_{ijk}J_k$$

となることがわかる．量子力学への拡張は，p も φ も有限領域($|p|\leqq\lambda$，$|\varphi|\leqq\pi$)を動くので，極座標の場合同様に自己共役演算子とはならず，むつかしい．しかし，(3.219)では，それがあたかも定義されたとして，ナイーヴに(極座標の(3.67)のように)経路積分表示を作ったようにみえる．演算子順序が問題になる J_1, J_2 では，Weyl 順序に相当する中点処方が現われるのもおもしろい．ただし，φ の積分領域は，S^1 のとき同様に巻き数 n で区別され，$-\infty<\varphi<\infty$ である．$p=\lambda\sin\theta$ とおくと，$-\lambda+\epsilon\leqq p\leqq\lambda-\epsilon$ であったことから $\epsilon'\leqq\theta\leqq\pi-\epsilon'$ で，積分領域は“穴のあいた球面”である(図 3-5)*.

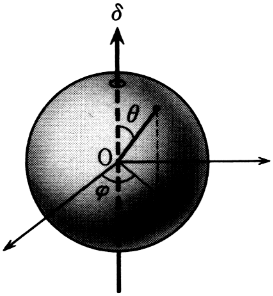


図 3-5 スピンの経路積分表示の積分領域．穴あきの球面で，その中を δ ($=0$ または 1/2) で与えられる“磁場”が貫いている．

こうした“周期的コヒーレント状態”は調和振動子の新しい経路積分表式に利用することができる．量子論でのハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m}p^2+\frac{m\omega^2}{2}q^2$$

において，(1.79)に従って a と $a^\dagger$ を導入する．

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q-i\frac{p}{m\omega}\right), \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q+i\frac{p}{m\omega}\right)$$
$$[a, a^\dagger] = 1, \qquad [a,a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0 \tag{3.221}$$

* K. Funahashi, T. Kashiwa, S. Nima and S. Sakoda: Nucl. Phys. **B453** (1995) 508 では，これについて詳しい議論をしている．

$$H=\frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a+aa^\dagger)=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) \tag{3.222}$$

$a^\dagger a$ の固有状態 $|n\rangle$

$$\begin{gathered} a^\dagger a|n\rangle=n|n\rangle \qquad (n=0,1,2,\cdots) \\ a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle, \qquad a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{gathered} \tag{3.223}$$

をスピンのときの $|m\rangle$ に代わって基礎とすることで

$$|\theta\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=0}^{\infty}e^{-in\theta}|n\rangle \tag{3.224}$$

を導入する．((3.162)のとき同様，この意味は $\epsilon>0$ として

$$|\theta\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=0}^{\infty}e^{-in\theta-n\epsilon}|n\rangle$$

である．)“単位の分解”が成立していること

$$\int_{-\pi}^{\pi}d\theta|\theta\rangle\langle\theta|=\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|=\boldsymbol{I} \tag{3.225}$$

は，(3.206)に注意すればただちにわかる．

(3.207)はいまの場合

$$\sum_{n=0}^{\infty}e^{in\theta}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\epsilon}^{\infty}dp\,e^{ip(\theta+2\pi n)} \qquad (0<\epsilon<1) \tag{3.226}$$

となる．これを(3.222)の行列要素に適用して

$$\begin{aligned} \langle\theta'|H|\theta\rangle &=\frac{1}{2\pi}\sum_{n=0}^{\infty}e^{in(\theta'-\theta)}\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ &=\frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\epsilon}^{\infty}dp\,e^{ip(\theta'-\theta+2\pi n)}\hbar\omega\left(p+\frac{1}{2}\right) \\ &\overset{p\to p-1/2}{=}\frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{1/2-\epsilon}^{\infty}dp\,e^{i(p-1/2)(\theta'-\theta+2\pi n)}\hbar\omega p \end{aligned} \tag{3.227}$$

同様に，(3.223)を考慮して

$$\langle\theta'|a|\theta\rangle=\frac{1}{2\pi}\sum_{n=0}^{\infty}e^{in(\theta'-\theta)}e^{-i\theta'}\sqrt{n}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} e^{in(\theta'-\theta)} e^{-i\theta'} \sqrt{n} \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{1-\epsilon}^{\infty} dp\, e^{ip(\theta'-\theta+2\pi n)} e^{-i\theta'} \sqrt{p} \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{1-\epsilon}^{\infty} dp\, e^{i(p-1/2)(\theta'-\theta+2\pi n)} (e^{-i(\theta'+\theta-2\pi n)/2} \sqrt{p})
\end{aligned}
\tag{3.228}
$$

ここで，1行目の最後で $n=0$ の和を落し，最後の関係式では(3.227)の表現と合わせるため，指数の肩を変形した．$a^\dagger$ についても，同じように

$$
\begin{aligned}
\langle\theta'|a^\dagger|\theta\rangle &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} e^{in(\theta'-\theta)} e^{i\theta} \sqrt{n} \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} e^{in(\theta'-\theta)} e^{i\theta} \sqrt{n} \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{1-\epsilon}^{\infty} dp\, e^{i(p-1/2)(\theta'-\theta+2\pi n)} (e^{i(\theta'+\theta+2\pi n)/2} \sqrt{p})
\end{aligned}
\tag{3.229}
$$

と求まる．(3.227)～(3.229)でのすべての積分の下限は新しい ϵ $(0<\epsilon<1/2)$ を導入することで共通にとれる．(以下では省略して 0 と書く．)

さて，$\alpha(t), \alpha^*(t)$ を c 数外場として

$$
H(t) = H + \alpha^*(t)a + a^\dagger \alpha(t) \tag{3.230}
$$

で与えられる Feynman 核は $\alpha(t_k)=\alpha_k$，$\alpha^*(t_k)=\alpha_k{}^*$ と書いて，

$$
\begin{aligned}
\langle\theta_{\rm f}|e^{-iTH(t)/\hbar}|\theta_{\rm i}\rangle &= \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N} \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\theta(k) \int_0^\infty \frac{dp(k)}{2\pi} \sum_{n_k=-\infty}^{\infty}\right] \exp\Bigg[i \sum_{k=1}^{N} \Bigg\{\left(p(k)\right. \\
&\left. -\frac{1}{2}\right)(\theta(k)-\theta(k-1)+2\pi n_k) - \frac{\Delta t}{\hbar}(\hbar\omega p(k) + \sqrt{p(k)} \\
&\times e^{i(\theta(k)+\theta(k-1)+2\pi n_k)/2}\alpha_k + \alpha_k{}^* \sqrt{p(k)}\, e^{-i(\theta(k)+\theta(k-1)-2\pi n_k)/2})\Bigg\}\Bigg]\Bigg|_{\theta(0)=\theta_{\rm i}} \langle\theta_{\rm f}|\theta_N\rangle
\end{aligned}
$$

となり，前とまったく同様の変数変換を行なうことで

$$
\langle\theta_{\rm f}|e^{-iTH(t)/\hbar}|\theta_{\rm i}\rangle = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta(k)\right]\left[\prod_{k=1}^{N} \int_0^\infty \frac{dp(k)}{2\pi\hbar}\right]
$$

$$\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}\left\{\left(p(k)-\frac{\hbar}{2}\right)\Delta\theta(k)-\Delta t\left(\omega p(k)+\sqrt{\frac{p(k)}{\hbar}}e^{i\bar{\theta}(k)}\alpha_k\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.+\alpha_k^*\sqrt{\frac{p(k)}{\hbar}}e^{-i\bar{\theta}(k)}\right)\right\}\right]\Bigg|_{\theta(N)=\theta_f+2\pi n,\,\theta(0)=\theta_i} \qquad (3.231)$$

と求まる．(3.231)では $p(k)\to p(k)/\hbar$ とスケールし，$n_k=n_k'-n_{k-1}'$ に対して

$$\theta(k)+\theta(k-1)\pm 2\pi n_k = \theta(k)+2\pi n_k'+\theta(k-1)+2\pi n_{k-1}'-\begin{cases}4\pi n_{k-1}'\\ 4\pi n_k'\end{cases}$$

を利用した．(3.231)が調和振動子の新しい経路積分公式である．ここで，古典論の(3.73)と(3.74)での議論を思い出そう．(3.73)と $a, a^\dagger$ の定義より(c 数とみなして)

$$a = \sqrt{\frac{P}{\hbar}}e^{-iQ}, \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{P}{\hbar}}e^{iQ} \qquad (3.232)$$

と書ける．これらとハミルトニアン(3.74)

$$H = \omega P \qquad (3.74)$$

を(3.231)と比べてみると，$P\to p(k)$，$Q\to\theta(k)$ の固有状態があたかも存在するようにして経路積分表示を求め，その際，演算子順序の問題の生じる(3.232)に対しては，中点処方が現われたようにみえる．ただしこのときの積分範囲は，P は古典論と一致するが，Q のほうは S^1 のとき同様に巻き数が生じる．そのかたちは，無限に長い茶筒を想像すればよい(図 3-6)．この茶筒の中を，$-1/2$ に相当する“磁束”が走っているわけである．

こうして，さきの正準変換の方法では実現できなかった(3.74)のハミルトニアンの経路積分は，周期的コヒーレント状態を用いた通常の $(a^\dagger, a)$ の経路積分公式として導出できることがわかった．

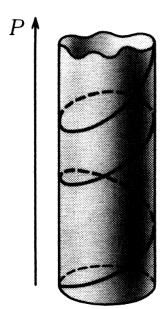


図 3-6 調和振動子 $H=\omega P$ ($a=\sqrt{P/\hbar}e^{-iQ}$) の積分領域．

第3章補遺

3-2節において，S^D 上に拘束された系を扱うためにDirac流の量子化を行ない，FS経路積分公式の厳密な表式として(3.141)を導いた．他方 S^1 のときには(3.155)のような量子化を採用することができて，FS経路積分公式には見られなかった α という自由度をもつ，より一般的な(3.166)が与えられた．ところが最近になって，後者の量子化を S^D の場合に一般化しDirac流の量子化を特殊ケースとする理論がどのようなものかが分かってきた．そこでは(3.166)に対応する式は，S^D の半径を ρ として $\sum_{a=1}^{D+1}\hat{x}_a{}^2=\rho^2$ の条件のもとに

$$
\begin{aligned}
&[\hat{x}_a, \hat{x}_b] = 0, \qquad [\hat{x}_c, \hat{G}_{ab}] = i(\hat{x}_a\delta_{cb}-\hat{x}_b\delta_{ca}) \\
&[\hat{G}_{ab}, \hat{G}_{cd}] = i(\delta_{ac}\hat{G}_{bd}-\delta_{ad}\hat{G}_{bc}+\delta_{bd}\hat{G}_{ac}-\delta_{bc}\hat{G}_{ad})
\end{aligned}
\tag{3.233}
$$

で与えられる．

ここで $\hat{x}_a$ $(a=1, 2, \cdots, D+1)$ は S^D 上の質点の位置を指定するHermite演算子，また $\hat{G}_{ab}(=-\hat{G}_{ba})$ もHermiteで，S^D 上で質点の位置を動かす働きをする．特に $D=1$ の場合 $\hat{p}=\hat{G}_{12}$，$\hat{W}=(\hat{x}_1+i\hat{x}_2)\rho^{-1}$ とすると，(3.166)は上式に帰着する．

(3.233)をみたす演算子は具体的に完全に決定できて興味ある性質をもつことが分かってきた．それは，$D\geqq 2$ の場合 $\hat{G}_{ab}$ が一般に D 次元空間でのスピンを内包していること，またこれと関連して特定のゲージポテンシャルの構造が現われてくることなどである．そうして各スピンの値に応じ，無限に多くの独立な量子力学の記述形式が存在することが示される．とくにスピンがゼロのもっとも簡単な場合は，ゲージポテンシャルも消滅して，理論は S^D 上への拘束系に対するDiracの量子化に帰着することが証明される．その意味で(3.233)はこのような拘束系に関する一般化された定式化といえよう*.

しかしながら(3.141)に対応する厳密な経路積分公式はこの場合まだ得られていない．

---

* くわしくはY. Ohnuki and S. Kitakado: J. Math. Phys. **34** (1993) 2827参照.

4 場の理論への適用

この章では，経路積分法の場の理論への適用について議論する．まず，場という連続無限個の自由度を有する量がきちんと定義できる，格子上の場の理論をとりあげる．スカラー場の議論では，Euclid 化の手法の有効性がいかんなく発揮されるような有効ポテンシャルの方法についてもふれる．次に，Dirac 場について論じる．そこではスカラー場と異なり，格子場にすることによって，連続理論でのカイラル対称性が保てなくなるという困難の生じることが示される．最後に，補助場の方法とよばれる，きわめて応用範囲の広い計算手段について少しふれる．

4-1 経路積分と場の量子論

“場”というものは連続無限個の自由度をもつ力学量で，たとえば，Δ をラプラシアンとして，

$$\left[-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\Delta-\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\phi(\boldsymbol{x},t)=0 \tag{4.1}$$

をみたすものを**スカラー場**という．ここで c は光速度，m は質量である．一

方，（くりかえしの文字は和をとることという約束のもと）

$$\left[\gamma_\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}\right]\psi(\boldsymbol{x}, t) = 0$$
$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (\mu = 1, 2, 3, 4), \qquad x_4 = ict \tag{4.2}$$

をみたすものを **Dirac 場**という．ここで，γ_μ は γ 行列とよばれる 4 行 4 列の Hermite 行列($\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu$)で

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} \equiv \gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \tag{4.3}$$

を満足する．簡単のため，スカラー場を例にとろう．これからは，記号の簡略化のために，$\hbar = c = 1$ という自然単位系を採ることにしよう．

(4.1)を導くようなラグランジアンは

$$L_0 = \int d^3\boldsymbol{x}\left[-\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 - \frac{m^2}{2}\phi^2\right] \tag{4.4}$$

であり，正準運動量

$$\pi(\boldsymbol{x}, t) \equiv \frac{\partial L_0}{\partial\dot{\phi}(\boldsymbol{x}, t)} = \dot{\phi}(\boldsymbol{x}, t) \tag{4.5}$$

およびハミルトニアン

$$H_0 = \int d^3\boldsymbol{x}\,\pi\dot{\phi} - L_0 = \int d^3\boldsymbol{x}\left[\frac{1}{2}\pi^2 + \frac{1}{2}(\partial_k\phi)^2 + \frac{m^2}{2}\phi^2\right] \tag{4.6}$$

は通常の手続きに従って得られる($\partial_k : k = 1, 2, 3$)．さて，ハミルトニアンと正準運動量が得られたから，量子化は，

$$[\phi(\boldsymbol{x}, t), \pi(\boldsymbol{y}, t)] = i\delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})$$
$$[\phi(\boldsymbol{x}, t), \phi(\boldsymbol{y}, t)] = 0, \qquad [\pi(\boldsymbol{x}, t), \pi(\boldsymbol{y}, t)] = 0 \tag{4.7}$$

により行なわれる．経路積分公式を作りあげるには，1-1 節と 1-2 節での議論を思い出すと，(演算子を区別するため，$\hat{\phi}, \hat{\pi}$ などと書いて)基礎ケット，ブラ

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x})|\phi\rangle = \phi(\boldsymbol{x})|\phi\rangle, \qquad \hat{\pi}(\boldsymbol{x})|\pi\rangle = \pi(\boldsymbol{x})|\pi\rangle$$
$$\langle\phi|\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) = \langle\phi|\phi(\boldsymbol{x}), \qquad \langle\pi|\hat{\pi}(\boldsymbol{x}) = \langle\pi|\pi(\boldsymbol{x}) \tag{4.8}$$

を導入し，それらに完全性の条件

$$\int |\phi\rangle\langle\phi| D\phi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I}$$
$$\int |\pi\rangle\langle\pi| D\pi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I} \tag{4.9}$$

を要請すればよかった．しかし，(4.9)での $D\phi(\boldsymbol{x})$，$D\pi(\boldsymbol{x})$ は数学的な意味付けがむつかしい汎関数積分測度である．そこで次のように考えることにしよう．連続無限個の自由度をもつ $\phi(\boldsymbol{x},t)$ を，箱(1辺の長さ L の立方体)に入れ，空間を差分化し，それぞれ N 等分する．こうすると

$$\boldsymbol{x} = a\boldsymbol{n}, \quad a \equiv \frac{L}{N} \quad (\text{格子定数}) \tag{4.10}$$

と書け，$\phi(\boldsymbol{x},t)$ は有限自由度の力学変数

$$\phi_{\boldsymbol{n}}(t) \equiv a\phi(a\boldsymbol{n},t) \tag{4.11}$$

となる．(a は，$\phi_{\boldsymbol{n}}(t)$ を無次元化するために入れた．自然単位系では，すべての次元は長さの次元を基準にしてあたえられており，$\phi(\boldsymbol{x},t)$ のそれは[長さ]$^{-1}$ であった.) 微分は差分となる．

$$\partial_k \phi(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{a^2}\nabla_k \phi_{\boldsymbol{n}}(t), \qquad \nabla_k f_{\boldsymbol{n}} \equiv f_{\boldsymbol{n}} - f_{\boldsymbol{n}-\hat{\boldsymbol{k}}} \tag{4.12}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{k}}$ は k 方向の単位ベクトルである．(4.4)のラグランジアンは，

$$L_0 = \frac{1}{a}\sum_{\boldsymbol{n}=1}^{N}\left[\frac{1}{2}(a\dot{\phi}_{\boldsymbol{n}})^2 - \frac{1}{2}(\nabla_k \phi_{\boldsymbol{n}})^2 - \frac{M^2}{2}\phi_{\boldsymbol{n}}{}^2\right] \tag{4.13}$$

と書ける．ただし，$\sum_{\boldsymbol{n}=1}^{N} \equiv \sum_{n_1=1}^{N}\sum_{n_2=1}^{N}\sum_{n_3=1}^{N}$ および

$$M = am \tag{4.14}$$

は無次元化した質量である．ハミルトニアン(4.6)および交換関係(4.7)も，

$$H_0 = \frac{1}{a}\sum_{\boldsymbol{n}=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\pi_{\boldsymbol{n}}{}^2 + \frac{1}{2}(\nabla_k \phi_{\boldsymbol{n}})^2 + \frac{M^2}{2}\phi_{\boldsymbol{n}}{}^2\right]$$
$$[\phi_{\boldsymbol{m}}, \pi_{\boldsymbol{n}}] = i\delta_{\boldsymbol{mn}}, \qquad [\phi_{\boldsymbol{m}}, \phi_{\boldsymbol{n}}] = 0, \qquad [\pi_{\boldsymbol{m}}, \pi_{\boldsymbol{n}}] = 0 \tag{4.15}$$

となる．こうすれば，もはや(4.9)での汎関数積分測度の問題もなくなり，ポテンシャル $V(\phi)$ と外場 $J_{\boldsymbol{n}}(t)$ のある

$$H^J(\pi,\phi;t) \equiv H_0+\frac{1}{a}\sum_{n=1}^{N}[V(\phi_n)+J_n(t)\phi_n]$$

の場合に，1-3節の(1.55)から(1.73)への議論をふたたびくりかえすことにより，Euclid経路積分表示

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_T[J] &\equiv \lim_{N\to\infty}\mathrm{Tr}\left[(1-\Delta tH_N{}^J)\cdots(1-\Delta tH_1{}^J)\right]\\ &= \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\prod_{n=1}^{N}\left[\iint\frac{d\pi_n(j)d\phi_n(j)}{2\pi}\right]\exp\left[\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=1}^{N}\left\{i\pi_n(j)\Delta\phi_n(j)-\frac{\Delta t}{a}\left(\frac{1}{2}\pi_n(j)^2\right.\right.\right.\\ &\qquad\left.\left.\left.+\frac{1}{2}(\nabla_k\phi_n(j))^2+\frac{M^2}{2}\phi_n(j)^2+V(\phi_n(j))+J_n(j)\phi_n(j)\right)\right\}\right]\Bigg|_{\phi_n(0)=\phi_n(N)}\end{aligned}$$

が得られ，$\pi_n(j)$ について積分すると($T=L$，つまり $a=\Delta t$ とおいて)

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_T[J] = \lim_{N\to\infty}\prod_{n_\mu=1}^{N}\int\frac{d\phi(n)}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\sum_{n_\mu=1}^{N}\left\{\frac{1}{2}(\nabla_\mu\phi(n))^2+\frac{M^2}{2}\phi(n)^2\right.\right.\\ \left.\left.+V(\phi(n))+J(n)\phi(n)\right\}\right]\Bigg|_{\text{periodic}} \qquad (4.16)\end{aligned}$$

となる．ただしここで $n_4\equiv j$ とし，n_μ ($\mu=1,2,3,4$) を導入して $\phi_n(j)\equiv\phi(n)$，$\prod_{n_\mu=1}^{N}\equiv\prod_{n_1=1}^{N}\prod_{n_2=1}^{N}\prod_{n_3=1}^{N}\prod_{n_4=1}^{N}$ などと書いた．もちろん

$$\nabla_\mu\phi(n) = \phi(n)-\phi(n-\hat{\mu}) \qquad (\mu=1,2,3,4) \qquad (4.17)$$

である．時間と空間をすべて同等に扱うために，空間方向の境界条件にも周期境界条件を課そう．こうして，(4.16)は4次元の超立方体(hypercube)における，格子場の理論となる．

(4.16)で N を有限にしたまま，計算機を用いて評価していくという場の理論の非摂動的な手法は近年，ますますさかんになっており，スカラー場では，

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4!}\phi^4$$

という相互作用のある場合，特にくわしく調べられている*.

* 興味は，$N\to\infty$ として，$L,T\to\infty$ としたときでも，相互作用のある理論になっているかどうかということにある．4次元以上では，厳密に相互作用はなくなることが示され，4次元においてもその方向での分析がなされている．

一方，摂動論や WKB 近似では，第 2 章の議論と同様に，連続表示を用いることができる．

$$\tilde{Z}_T[J] \equiv e^{-W[J]/\hbar} = \int [D\phi] \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\{S[\phi]+\phi\cdot J\}\right]$$

$$S[\phi] \equiv \int d^4x \left[\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 + U(\phi)\right] \tag{4.18}$$

$$U(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2 + V(\phi) \qquad \phi\cdot J \equiv \int d^4x\,\phi(x)J(x)$$

ここで，WKB 近似を行なうため，$\hbar$ を復活した．また $W[J]$ は(2.83)で導入した Green 関数の連結成分の母関数である．

$$\frac{\delta W}{\delta J(x)} \equiv \phi_c(x) = \frac{1}{\tilde{Z}_T[J]} \int [D\phi]\phi(x) e^{-(S+\phi\cdot J)/\hbar} \tag{4.19}$$

と書き，さらに

$$\left.\frac{\delta^2 W}{\delta J(x)\delta J(y)}\right|_{J=0} \equiv G^{(2)}(x,y)_{\text{conn.}}$$
$$= \left|\frac{1}{\tilde{Z}_T[J]}\left\{\int [D\phi]\phi(x)\phi(y)e^{-(S+\phi\cdot J)/\hbar}\right\} - \phi_c(x)\phi_c(y)\right|_{J=0} \tag{4.20}$$
$$\left.\frac{\delta^n W}{\delta J(x_1)\cdots\delta J(x_n)}\right|_{J=0} \equiv G^{(n)}(x_1,\cdots,x_n)_{\text{conn.}}$$

などと書くと，$W[J]$ は $J(x)$ で Taylor 展開されて

$$W[J] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^4x_1 \cdots d^4x_n J(x_1)\cdots J(x_n) G^{(n)}(x_1,\cdots,x_n)_{\text{conn.}} \tag{4.21}$$

と与えられることになる．($G^{(n)}(x_1,\cdots,x_n)_{\text{conn.}}$ が実際に連結成分だけから成り立つことは，(4.20)から，あるいはもっと高い微分を実際行なってみればわかる.)

ここで，1-3 節で議論した Euclid 表示の効用について論じよう．まず，その摂動論的側面での有用性について議論する．(4.18)を摂動論で計算する際，(2.84)と同様に，

$$\tilde{Z}_T[J] = N\exp\left[-\int \frac{d^4x}{\hbar}V\left(-\hbar\frac{\delta}{\delta J(x)}\right)\right]\exp\left[-\frac{1}{2\hbar}\int d^4x d^4y J(x)\varDelta(x-y)J(y)\right] \tag{4.22}$$

となる．ただし，$\varDelta(x)$ は伝搬関数であり，$\Box=\sum_{\mu=1}^{4}\partial_\mu{}^2$ と書くと

$$(-\Box+m^2)\varDelta(x) = \delta^4(x) \tag{4.23}$$

をみたす．(4.22)を導くのはたびたび用いた手法，すなわち(4.18)で $V(\phi)$ をはずして，のこった指数関数の肩

$$-\frac{1}{\hbar}\int d^4x\left[\frac{1}{2}\phi(x)(-\Box+m^2)\phi(x)+J(x)\phi(x)\right]$$

をみて，ϕ を

$$\phi(x) \rightarrow \phi(x)-\int d^4y\varDelta(x-y)J(y)$$

とシフトすればよい．従って無限大の因子 N は $N\equiv[\det(-\Box+m^2)]^{-1/2}$ である．さて，Euclid 化の効用は，(4.23)で定義される伝搬関数の簡潔さにある．Fourier 変換してみれば，$p^2+m^2\neq 0$，であるから

$$\varDelta(x) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^4p}{(2\pi)^4}\frac{e^{ip\cdot x}}{p^2+m^2}$$
$$p\cdot x \equiv \sum_{\mu=1}^{4}p_\mu x_\mu, \qquad p^2 = \sum_{\mu=1}^{4}p_\mu{}^2 \tag{4.24}$$

となり，何の問題もなく計算できる．（答えは変形された Bessel 関数で与えられるが，ここではあらわに書かない．）一方，もし Minkowski 表示のままであったとすると，$x_4\rightarrow ix_0$ としてみれば，(4.23)の Fourier 変換は

$$(-p_0{}^2+\boldsymbol{p}^2+m^2)\tilde{\varDelta}(p_0,\boldsymbol{p}) = 1$$

となって，

$$p_0 = \pm\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2} \tag{4.25}$$

で $\tilde{\varDelta}(p_0,\boldsymbol{p})$ は極をもつことになる．こうした極をわれわれは**粒子**とよんでいる．したがって，この極をさけるため，$0<\epsilon\ll 1$ を用いて

$$\varDelta_{\mathrm{F}}(x) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^4p}{(2\pi)^4}\frac{e^{-ip_0x_0+i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}}{-p_0{}^2+\boldsymbol{p}^2+m^2-i\epsilon} \tag{4.26}$$

とした伝搬関数(これを **Feynman 伝搬関数**とよぶ)を使うのである．ほかにもいろいろな極のよけ方が存在し，それぞれに対し伝搬関数が定義されることになる．Euclid 化の方法では，こうした問題はおきない．

次に，非摂動論的な側面を議論する．この点に関して，Euclid 化の方法は特に場の理論においてその威力を発揮する．というのは，場の理論では自由度が無限大であるため，**対称性の自発的破れ**(spontaneous symmetry breaking)という現象がおこりうるからである．これは，ラグランジアンやハミルトニアンに存在する対称性(たとえば(4.18)で $V(\phi)=\lambda\phi^4/4!$ のとき，$\phi\leftrightarrow-\phi$ で不変)が，真空では保たれないことから生ずる．くわしい解説は本講座『場の量子論』にゆずるとして，要するに場の理論ではラグランジアン，ハミルトニアンを与えただけでは理論は決まらず，どの真空が与えられた理論のパラメータ(質量 m や結合定数 λ の値)で実現するのかということが問題になる．ここに，Euclid 経路積分表示が威力をふるう．なぜなら，それは与えられた条件の下で，常に基底状態をひきだすからである．

そこで，こうした基底状態をさがす標準的な手法である**有効ポテンシャル**(effective potential)の方法について少し述べよう．それには外場 $J(x)$ の代わりに，(4.19)で定義される $\phi_c(x)$ を変数にとる．そのため，Legendre 変換

$$\Gamma[\phi_c] = W[J]-\phi_c\cdot J \tag{4.27}$$

により，**有効作用**(effective action)を導入する．こうよばれる理由はいずれあきらかになる．まず

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\phi_c(x)} = \frac{\delta W}{\delta J(y)}\frac{\delta J(y)}{\delta\phi_c(x)} - J(x) - \phi_c(y)\frac{\delta J(y)}{\delta\phi_c(x)} = -J(x)$$

に注意しよう．くりかえしの文字は積分を含む．さらに微分して，

$$\Gamma^{(2)}(x_1, x_2) \equiv \frac{\delta^2\Gamma}{\delta\phi_c(x_1)\delta\phi_c(x_2)} = -\frac{\delta J(x_1)}{\delta\phi_c(x_2)} = -[G^{(2)}(x_1, x_2)_{\text{conn.}}]^{-1}$$

ここで $(\delta J(x_1)/\delta\phi_c(y))(\delta\phi_c(y)/\delta J(x_2))=\delta^4(x_1-x_2)$ と(4.20)を用いた．

$$\Gamma^{(3)}(x_1, x_2, x_3) \equiv \frac{\delta^3\Gamma}{\delta\phi_c(x_1)\delta\phi_c(x_2)\delta\phi_c(x_3)}$$

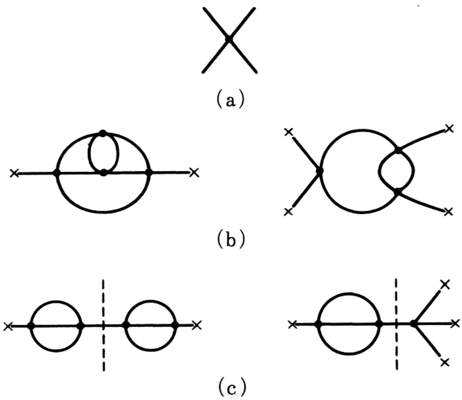


図 4-1　$V=\lambda\phi^4/4!$ のときの 1 粒子既約なグラフ．(a)ヴァーテックスの形，(b)1 粒子既約なグラフ，(c)1 粒子既約でないグラフ．×印は外場 J を表わす．

$$= [G^{(2)}(x_1, y_1)_{\text{conn.}}]^{-1}[G^{(2)}(x_2, y_2)_{\text{conn.}}]^{-1}[G^{(2)}(x_3, y_3)_{\text{conn.}}]^{-1} \times G^{(3)}(y_1, y_2, y_3)_{\text{conn.}}$$

のように $\Gamma^{(n)}$ が求まる．それらは，外線の足をとりさり，内線の 1 本を切っても 2 つに分かれない(**1 粒子規約，one-particle-irreducible**)**ヴァーテックス関数**とよばれる．これらにより有効作用は

$$\Gamma[\phi_c] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int d^4x_1\cdots d^4x_n\phi_c(x_1)\cdots\phi_c(x_n)\Gamma^{(n)}(x_1,\cdots,x_n) \tag{4.28}$$

と与えられる．$\Gamma[\phi_c]$ を WKB 近似で求めよう．(4.18)と(4.27)より

$$e^{-\Gamma[\phi_c]/\hbar} = \int[D\phi]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\{S[\phi]+(\phi-\phi_c)\cdot J\}\right]$$

と書ける．いつものように，古典運動方程式の解を $\phi_0(x)$ としよう．

$$\left.\frac{\delta S}{\delta\phi(x)}\right|_{\phi_0}+J(x) = 0$$

右辺の指数の肩を ϕ_0 で展開して，(2.116)のように書く．すなわち，

$$e^{-\Gamma[\phi_c]/\hbar} \cong e^{-(S[\phi_0]+(\phi_0-\phi_c)\cdot J)/\hbar}[\det S^{(2)}[\phi_0]]^{-1/2}\exp[O(\hbar)]$$

ただし，

$$\exp[O(\hbar)] \equiv \frac{1}{[\det S^{(2)}[\phi_0]]^{-1/2}} \int [D\phi] \exp\left[-\frac{1}{2}(\phi)^2 \cdot \frac{\delta^2 S}{\delta \phi^2}\bigg|_{\phi_0} - \frac{1}{\hbar} \sum_{n \geqq 3} \frac{1}{n!} (\sqrt{\hbar}\,\phi)^n \cdot S^{(n)}[\phi_0] \right]$$

で,

$$[\det S^{(2)}[\phi_0]]^{-1/2} \equiv \left[\det \frac{\delta^2 S}{\delta \phi^2}\bigg|_{\phi_0} \right]^{-1/2} \equiv \int [D\phi] \exp\left[-\frac{1}{2}(\phi)^2 \cdot \frac{\delta^2 S}{\delta \phi^2}\bigg|_{\phi_0} \right]$$

$$(\phi)^2 \cdot \frac{\delta^2 S}{\delta \phi^2}\bigg|_{\phi_0} \equiv \int d^4x_1 d^4x_2 \phi(x_1)\phi(x_2) \frac{\delta^2 S}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)}\bigg|_{\phi_0}$$

$$(\sqrt{\hbar}\,\phi)^n \cdot S^{(n)}[\phi_0] \equiv \int d^4x_1 \cdots d^4x_n (\sqrt{\hbar}\,\phi(x_1)) \cdots (\sqrt{\hbar}\,\phi(x_n)) \frac{\delta^n S}{\delta\phi(x_1)\cdots\delta\phi(x_n)}\bigg|_{\phi_0}$$

などと書いた(ここでは(2.116)の $O(\hbar)$ 項を指数関数の肩に乗せた). こうして,

$$\Gamma[\phi_c] = S[\phi_0] + (\phi_0 - \phi_c) \cdot J + \frac{\hbar}{2} \operatorname{Tr} \ln S^{(2)}[\phi_0] + O(\hbar^2) \qquad (4.29)$$

で与えられる. ここで

$$\det S^{(2)}[\phi_0] = e^{\operatorname{Tr} \ln S^{(2)}[\phi_0]} \qquad (4.30)$$

を用いた. (Van Vleck 行列式(2.115)は固有値の積でかけているので, 無限乗積の問題を別にすれば(4.30)は容易に理解できよう.)

次に $\phi_c(x)$ と $\phi_0(x)$ の関係を WKB 近似で調べていこう. (4.19)をみれば, それは,

$$\phi_c(x) = \phi_0(x) + \hbar\phi_1(x) + O(\hbar^2)$$

$$\hbar\phi_1(x) + O(\hbar^2) \equiv \frac{\int [D\phi](\sqrt{\hbar}\,\phi(x)) \exp\left[-\frac{1}{2}(\phi)^2 \cdot S^{(2)}(\phi_0) - \frac{\sqrt{\hbar}}{3!}(\phi)^3 \cdot S^{(3)}(\phi_0) - \cdots \right]}{\int [D\phi] \exp\left[-\frac{1}{2}(\phi)^2 \cdot S^{(2)}(\phi_0) - \frac{\sqrt{\hbar}}{3!}(\phi)^3 \cdot S^{(3)}(\phi_0) - \cdots \right]}$$

となる. これを ϕ_0 について解いて, (4.29)に代入すれば

$$\Gamma[\phi_c] = S[\phi_c - \hbar\phi_1] - \hbar\phi_1 \cdot J + \frac{\hbar}{2} \operatorname{Tr} \ln S^{(2)}[\phi_c - \hbar\phi_1] + O(\hbar^2)$$

$$= S[\phi_c] + \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{Tr}\ln S^{(2)}[\phi_c] - \hbar\left(\frac{\delta S}{\delta\phi_c} + J\right)\cdot\phi_1 + O(\hbar^2)$$

$$= S[\phi_c] + \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{Tr}\ln S^{(2)}[\phi_c] + O(\hbar^2) \tag{4.31}$$

が得られる．2行目から3行目への変換は，ϕ_0（$=\phi_c+O(\hbar)$）が運動方程式の解であることを使った．

(4.31)をみると，$\Gamma[\phi_c]$ は古典的作用 $S[\phi_c]$ のループ補正を含めたものと理解され，この意味で有効作用とよばれる．（WKB近似はループ展開でもあったことを思い出そう．）

さて，有効作用の物理的意味を考えてみよう．外場 $J(x)$ が x によらず一定の値をとるとき，(4.18)で

$$W[J] \equiv \left(\int d^4x\right)\epsilon(J) \equiv L^3 T\epsilon(J) \tag{4.32}$$

と書く．$\epsilon(J)$ は，1-3節の議論を思い出すと，十分大きな T に対して，基底状態 $|0\rangle$ によって

$$\epsilon(J) = \langle 0|H + \int d^3x\,\phi^{\mathrm{op}}(x)J|0\rangle \tag{4.33}$$

と与えられる．ただし，H は単位体積あたりのハミルトニアンであり，演算子であることを示すため $\phi^{\mathrm{op}}(x)$ と書いた．基底状態 $|0\rangle$ は並進対称，すなわち並進演算子

$$e^{-iP\cdot x}\phi^{\mathrm{op}}(0)e^{iP\cdot x} = \phi^{\mathrm{op}}(x)$$

で $e^{iP\cdot x}|0\rangle = |0\rangle$ であることより，(4.19)は，$J(x)\to J$ のとき

$$\phi_c(0) \equiv \phi_c = \langle 0|\phi^{\mathrm{op}}(x)|0\rangle \tag{4.34}$$

を意味する．(4.33)と(4.34)より

$$\epsilon(J) = \langle 0|H|0\rangle + \phi_c J \tag{4.35}$$

である．このとき

$$\Gamma[\phi_c] \equiv \left(\int d^4x\right)V_{\mathrm{eff}}(\phi_c) = L^3 T V_{\mathrm{eff}}(\phi_c) \tag{4.36}$$

と書くと，(4.27)と(4.32)，(4.35)を考慮して

$$V_{\text{eff}}(\phi_c) = \langle 0|H|0\rangle \tag{4.37}$$

となる．$V_{\text{eff}}(\phi_c)$ を**有効ポテンシャル**(effective potential)とよぶ*．こうして，基底状態のエネルギーは有効ポテンシャルの最小値で与えられることがわかった**．もう一度注意しておこう．(4.32)，(4.36)でわかるように Euclid 化のおかげで $\exp[-TL^3\epsilon(J)]$，$\exp[-TL^3V_{\text{eff}}(\phi_c)]$ が得られ，$T\to\infty$ で有効ポテンシャルの最小値によって基底状態がとりだせることになる．

次に Dirac 場の議論をしよう．4 次元とともに 2 次元での話もよくされるので，一般に次元は d としておく．量子化された Dirac 場は，(Schrödinger 表示で)

$$\begin{aligned}\{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta{}^\dagger(\boldsymbol{y})\} &= \delta_{\alpha\beta}\delta^{d-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\ \{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{y})\} &= 0 = \{\hat{\psi}_\alpha{}^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta{}^\dagger(\boldsymbol{y})\}\end{aligned} \tag{4.38}$$

で与えられる(記号の簡単化のため，ここでは ＾ を演算子につける)．$\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})$ の添字 α は γ 行列(4.3)の作用する部分で，スピン自由度とよばれる．格子場は，(4.11)のように，

$$\hat{\psi}_{\boldsymbol{n},\alpha} \equiv a^{(d-1)/2}\hat{\psi}_\alpha(a\boldsymbol{n}) \tag{4.39}$$

で定義する．$a^{(d-1)/2}$ は(4.38)のはじめの反交換関係から $\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\boldsymbol{x})$ の次元が $[L]^{-(d-1)/2}$ であることよりつけた．Fermi 粒子の経路積分表示の議論 1-5 節より，生成，消滅演算子をひとたび決定すれば，それらに対するコヒーレント状態(1.132)～(1.139)により経路積分公式(1.161)が得られる．

そうした種々の場合を議論するため，γ 行列($d=2$ では 2 行 2 列)により作られる射影演算子 $\Gamma^{(\pm)}$

---

* (4.37)は，(4.34)の条件をみたす基底状態(ϕ_c の関数)でハミルトニアンの期待値をとったということである．

** 計算の最後で $J\to 0$ とする外場の物理的意味を知るため，対称性の自発的破れをおこす典型例，Heisenberg のスピン模型 $H=-\kappa\sum_{\langle i,j\rangle}\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_j$ を考えよう．(κ は定数(>0)，$\boldsymbol{\sigma}_i$ は Pauli のスピン行列が点 i 上にあるとしたもので，$\langle i,j\rangle$ は隣りあう 2 点を意味する．) これによると，隣りあうスピンは互いに平行になるほうがエネルギー的に得をすることがわかる．しかし，どの方向を向くのかはこれでは決まらない．そこで，外場を z 軸方向に $\sigma_i{}^z J$ としてつけ加えてやればすべてのスピンが z 軸方向を向いて，これは $J\to 0$ としたあとでも変わらず，対称性の自発的破れが実現したことになる．このように，外場 J は対称性の自発的破れをさがす触媒のような役目を果たす．

$$(\Gamma^{(\pm)})^2 = \Gamma^{(\pm)}, \qquad \Gamma^{(+)}+\Gamma^{(-)} = I$$
$$\Gamma^{(\pm)\dagger} = \Gamma^{(\pm)} \tag{4.40}$$

を導入する．1 行目の関係より，$\Gamma^{(+)}\Gamma^{(-)}=\Gamma^{(-)}\Gamma^{(+)}=0$．これを用いて，$\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}$, $\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^\dagger$ を

$$\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(\pm)} \equiv \Gamma^{(\pm)}\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}, \qquad \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(\pm)\dagger} \equiv \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^\dagger\Gamma^{(\pm)} \tag{4.41}$$

と分解する．スピン自由度の足は省略した．以下も同様であるが，成分の数(4 次元では 4 成分，2 次元では 2 成分)は半分になっていることに注意しよう．反交換関係は，

$$\{\hat{\psi}_{\boldsymbol{m}}{}^{(+)}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)\dagger}\} = \{\hat{\psi}_{\boldsymbol{m}}{}^{(-)}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)\dagger}\} = \delta_{\boldsymbol{mn}} \tag{4.42}$$

で，そのほかはすべてゼロである．

$$\{\hat{\psi}_{\boldsymbol{m}}{}^{(+)}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)\dagger}\} = \{\hat{\psi}_{\boldsymbol{m}}{}^{(-)}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)\dagger}\} = \{\hat{\psi}_{\boldsymbol{m}}{}^{(\cdot)}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(\cdot)}\} = \{\hat{\psi}_{\boldsymbol{m}}{}^{(\cdot)\dagger}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(\cdot)\dagger}\} = 0$$

((·)は ± のどちらをとってもよい.) ここで，消滅演算子として，

$$\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)}|0\rangle = 0 = \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)\dagger}|0\rangle \tag{4.43}$$

を採用する．つまり，1-5 節での生成，消滅演算子を

$$a_k \to (\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)\dagger}), \qquad a_k{}^\dagger \to (\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)\dagger}, \hat{\psi}_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)})$$

ととる．対応するコヒーレント状態を Grassmann 数

$$\xi_k \to (\psi_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)}, \psi_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)*}), \qquad \xi_k{}^* \to (\psi_{\boldsymbol{n}}{}^{(+)*}, \psi_{\boldsymbol{n}}{}^{(-)})$$

を導入して作りあげれば，(1.161)の指数関数の肩で，

$$\sum_{j=1}^{N}(\xi_j{}^*\cdot\varDelta\xi_j) \to \sum_{j=1}^{N}\sum_{\boldsymbol{n}=1}^{N}\{\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(+)*}(\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(+)}-\psi_{\boldsymbol{n},j-1}{}^{(+)})$$
$$+\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(-)}(\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(-)*}-\psi_{\boldsymbol{n},j-1}{}^{(-)*})\} \tag{4.44}$$

のようになる．積分測度は，スピン自由度も考慮し，

$$\left(\prod_j d^n\xi_j d^n\xi_j{}^*\right) \to \begin{cases} \prod_j\prod_{\boldsymbol{n}} d\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(-)*}d\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(+)}d\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(+)*}d\psi_{\boldsymbol{n},j}{}^{(-)} & (d=2) \\ \prod_j\prod_{\boldsymbol{n}} d\psi_{\boldsymbol{n},j,2}{}^{(-)*}d\psi_{\boldsymbol{n},j,1}{}^{(-)*}d\psi_{\boldsymbol{n},j,2}{}^{(+)}d\psi_{\boldsymbol{n},j,1}{}^{(+)} & \\ \quad\times d\psi_{\boldsymbol{n},j,1}{}^{(+)*}d\psi_{\boldsymbol{n},j,2}{}^{(+)*}d\psi_{\boldsymbol{n},j,1}{}^{(-)}d\psi_{\boldsymbol{n},j,2}{}^{(-)} & (d=4) \end{cases} \tag{4.45}$$

となる．いくつかの場合について調べてみよう．

(i) $\Gamma^{(\pm)} = \dfrac{1 \pm \gamma_4 e^{i\theta\gamma_5}}{2}\left(\dfrac{1 \pm \gamma_2 e^{i\theta\gamma_5}}{2}\right) \qquad d = 4\,;\ \gamma_5 \equiv \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$ $(d=2\,;\ \gamma_5 = i\gamma_1\gamma_2)$

記法

$$n \equiv (n_1, n_2, n_3, n_4 \equiv j) \quad (\text{あるいは}\ n \equiv (n_1, n_2 \equiv j))$$
$$\psi_n \equiv (\psi_n{}^{(+)}, \psi_n{}^{(-)}), \qquad \psi_n{}^* \equiv (\psi_n{}^{(+)*}, \psi_n{}^{(-)*}) \tag{4.46}$$
$$\bar{\psi}_n \equiv \psi_n{}^*\gamma_4 \quad (d=4), \qquad \bar{\psi}_n \equiv \psi_n{}^*\gamma_2 \quad (d=2)$$

を用いると，(4.44)は

$$\sum_n \left[\frac{1}{2}(\bar{\psi}_n\gamma_4\psi_{n+\hat{4}} - \bar{\psi}_{n+\hat{4}}\gamma_4\psi_n) - \frac{1}{2}(\bar{\psi}_n e^{i\theta\gamma_5}\psi_{n+\hat{4}} + \bar{\psi}_{n+\hat{4}} e^{i\theta\gamma_5}\psi_n - 2\bar{\psi}_n e^{i\theta\gamma_5}\psi_n)\right]$$
$$= \frac{1}{2}\sum_n [\bar{\psi}_n\gamma_4(\psi_{n+\hat{4}} - \psi_{n-\hat{4}}) - \bar{\psi}_n e^{i\theta\gamma_5}(\psi_{n+\hat{4}} + \psi_{n-\hat{4}} - 2\psi_n)] \tag{4.47}$$

となる．ただし，2行目へは反周期条件を用いた

$$\sum_n \bar{\psi}_{n+\hat{4}}\gamma_4\psi_n = \sum_n \bar{\psi}_n\gamma_4\psi_{n-\hat{4}}$$

を使った．2次元のときは，$\gamma_4 \to \gamma_2$，$\hat{4} \to \hat{2}$ とすればよい．積分測度(4.45)は，すべての次元で

$$(4.45) = \prod_n d\psi_n d\bar{\psi}_n \tag{4.48}$$

となる*.

これまで，ハミルトニアンについては何もふれなかったが，Dirac 場は相対論的に不変(つまりその運動速度は光速度にくらべて，それほど小さくない)に構成されるべきである．((4.2)は相対論的に不変である.) もちろんわれわれの経路積分公式は格子上に乗ってしまっているので，相対論的不変性はあらわ

---

* $d=2$ のとき，$\gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ をとれば，$\bar{\psi}_n = (i\psi_n{}^{(-)*}, -i\psi_n{}^{(+)*})$ であるから，(1.109)，(1.113)より $d\psi_n = d\psi_n{}^{(-)}d\psi_n{}^{(+)}$，$d\bar{\psi}_n = d\psi_n{}^{(-)*}d\psi_n{}^{(+)*}$ で(4.48)と(4.45)が等しいことがわかる．また $d=4$ のとき，$\gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ をとり，$\psi_n = (\psi_{n,1}{}^{(+)}, \psi_{n,2}{}^{(+)}, \psi_{n,1}{}^{(-)}, \psi_{n,2}{}^{(-)})$ と書くと，$\bar{\psi}_n = (\psi_{n,1}{}^{(-)*}, \psi_{n,2}{}^{(-)*}, \psi_{n,1}{}^{(+)*}, \psi_{n,2}{}^{(+)*})$ であるから，$d\psi_n = d\psi_{n,2}{}^{(-)}d\psi_{n,1}{}^{(-)}d\psi_{n,2}{}^{(+)}d\psi_{n,1}{}^{(+)}$，$d\bar{\psi}_n = d\psi_{n,1}{}^{(-)*}d\psi_{n,2}{}^{(-)*}d\psi_{n,1}{}^{(+)*}d\psi_{n,2}{}^{(+)*}$ となり，$(4.45) = \prod_n d\psi_n d\bar{\psi}_n$ が示せる．

な形でもつべくもないが，時空の対称性は最低限要請すべきことであろう．こうしておいて，計算後，$a=\Delta t\to 0$ をとれば相対論的不変性が（いまの場合は Euclid 不変性が）期待できるというわけである．

そこで，時間部分が(4.47)であるとすると，ハミルトニアンとして

$$\hat{H}=\frac{1}{a}\left[\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{n},k}\left[\hat{\bar{\psi}}_{\boldsymbol{n}}\gamma_k(\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}+\hat{\boldsymbol{k}}}-\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}-\hat{\boldsymbol{k}}})-\hat{\bar{\psi}}_{\boldsymbol{n}}e^{i\theta\gamma_5}(\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}+\hat{\boldsymbol{k}}}+\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}-\hat{\boldsymbol{k}}}-2\hat{\psi}_{\boldsymbol{n}})\right]+\sum_{\boldsymbol{n}}M\hat{\bar{\psi}}_{\boldsymbol{n}}\bar{\psi}_{\boldsymbol{n}}\right] \tag{4.49}$$

を採用することが望ましい．ここで M は質量(4.13)である．演算子順序を(1.161)で $\alpha=-1/2$ の反ノーマル順序とすれば，(4.47)と(4.49)，および $a=\Delta t$ として経路積分公式

$$Z(T)\equiv\mathrm{Tr}\,e^{-T\hat{H}}=\lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N}\int d\psi_n d\bar{\psi}_n\exp[S^{(\mathrm{i})}[\bar{\psi},\psi]]$$

$$S^{(\mathrm{i})}[\bar{\psi},\psi]=\sum_{\boldsymbol{n},\mu}-\frac{1}{2}\{\bar{\psi}_n\gamma_\mu(\psi_{n+\hat{\mu}}-\psi_{n-\hat{\mu}})-\bar{\psi}_n e^{i\theta\gamma_5}(\psi_{n+\hat{\mu}}+\psi_{n-\hat{\mu}}-2\psi_n)\}$$
$$-\sum_{n}\bar{\psi}_n M\psi_n \tag{4.50}$$

が得られる．(4.50)の指数関数の肩を**格子上の Fermi 作用**という．Fermi 作用の第1項を**ナイーヴ Dirac 項**とよび，第2項を **Wilson 項**，第3項を質量項とそれぞれよぶ．

このようによばれる理由について説明することは，格子上の Dirac 場のかかえる問題についても論じることになり，有益と思われる．われわれの道筋は，スカラー場のときとは異なっていた．というのは，もしスカラー場と同様の議論で作用が与えられるとするなら，(4.50)の作用 $S^{(\mathrm{i})}$ には Wilson 項がないはずだからである．そのときの運動方程式は（$M=0$ として）

$$\sum_{\mu}\gamma_\mu(\psi_{n+\hat{\mu}}-\psi_{n-\hat{\mu}})=0$$

である．表記の簡単のため格子点の数 N を無限大とすると，ψ_n の Fourier 変換は，

$$\psi_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{ip\cdot n} \tilde{\psi}(p), \qquad \bar{\psi}_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{-ip\cdot n} \tilde{\bar{\psi}}(p) \tag{4.51}$$

$(p\cdot n \equiv \sum_\mu p_\mu n_\mu)$で与えられるので，運動方程式は

$$\sum_\mu (i\gamma_\mu \sin p_\mu)\tilde{\psi}(p) = 0$$

となる．$\tilde{\psi}(p) \neq 0$ であるとすると，左から $\left(\sum_\mu i\gamma_\mu \sin p_\mu\right)$ をかけて，

$$\left(\sum_\mu \gamma_\mu f_\mu\right)^2 = \sum_\mu (f_\mu)^2 \tag{4.52}$$

を用いれば，結局

$$\sum_\mu \sin^2 p_\mu = 0 \tag{4.53}$$

がみたされねばならない．これを分散関係という．まったく同じ考察を，(4.2)(の $m=0$)で行なうと，

$$\sum_\mu p_\mu{}^2 = 0$$

が得られる．これをみたすのは，$p_\mu = (0, 0, \cdots, 0)$ の 1 点だけであるが，(4.53)には，周期関数 $\sin p_\mu$ のため，

$$p_\mu = 0 \quad \text{または} \quad p_\mu = \pi$$

の合計 2^d 個の点が寄与する．(4.25)で定義したのと同様こうした零点を粒子とよぶことにすると，ナイーヴ Dirac 項からなるナイーヴ Dirac 作用

$$S_{M=0}{}^{\mathrm{ND}}[\bar{\psi}, \psi] \equiv \sum_{n,\mu} \left[-\frac{1}{2} \bar{\psi}_n \gamma_\mu (\psi_{n+\hat{\mu}} - \psi_{n-\hat{\mu}}) \right] \tag{4.54}$$

は，連続の Dirac 作用($m=0$)

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int d^d x (-\bar{\psi}\gamma_\mu \partial_\mu \psi)$$

に対して，余分の粒子を含んでいることになる．こうした現象を，**粒子重複**(species doubling)という．

ところが，$S^{(\mathrm{i})}$ は

$$S_{M=0}{}^{(\mathrm{i})} = -\int_{-\pi}^{\pi}\frac{d^dp}{(2\pi)^d}\bar{\tilde{\psi}}(p)\sum_{\mu}\left[i\gamma_\mu \sin p_\mu + (1-\cos p_\mu)\right]\tilde{\psi}(p) \qquad (4.55)$$

と，Fourier 変換(4.51)を用いて書けるので，零点は

$$\sum_{\mu}\left[\sin^2 p_\mu + (1-\cos p_\mu)^2\right] = 0 \qquad (4.56)$$

で与えられ，Wilson 項の寄与 $\sum_{\mu}(1-\cos p_\mu)^2$ のため連続と同じ $p_\mu=0$ の点だけが寄与することがわかる*.

これで，$S^{(\mathrm{i})}$ には粒子重複の問題はなく，すべて連続理論を格子上で再現できるかというと決してそうではない．連続理論でのラグランジアン

$$\mathcal{L}_0 = -\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\partial_\mu\psi(x)$$

は，カイラル変換

$$\psi(x) \to e^{i\alpha\gamma_5}\psi(x), \qquad \bar{\psi}(x) \to \bar{\psi}(x)e^{i\alpha\gamma_5} \qquad (\alpha \text{ は定数}) \qquad (4.57)$$

に対して不変である($\{\gamma_5, \gamma_\mu\}=0$)．同じことであるがカイラル分解

$$\psi = \psi_{\mathrm{L}} + \psi_{\mathrm{R}}, \qquad \bar{\psi} = \bar{\psi}_{\mathrm{L}} + \bar{\psi}_{\mathrm{R}}$$

$$\psi_{\substack{\mathrm{L}\\\mathrm{R}}} \equiv \frac{1\pm\gamma_5}{2}\psi, \qquad \bar{\psi}_{\substack{\mathrm{L}\\\mathrm{R}}} \equiv \bar{\psi}\frac{1\mp\gamma_5}{2}$$

に対して,

$$\mathcal{L}_0 = -\bar{\psi}_{\mathrm{L}}\gamma_\mu\partial_\mu\psi_{\mathrm{L}} - \bar{\psi}_{\mathrm{R}}\gamma_\mu\partial_\mu\psi_{\mathrm{R}}$$

のように，L と R 独立な項に分かれる．ところでニュートリノという粒子は質量がゼロの Dirac 粒子で，$\psi_{\mathrm{L}}(x)$ というニュートリノしか自然界には存在していないことがわかっている．このことは，格子上の Dirac 場の理論には，ニュートリノが存在できないことを意味している．というのは，$M=0$ としても，Wilson 項のため，格子上でのカイラル変換が破れ(Wilson 項は，カイラル分解しても L と R に分かれない)，ψ_{R} のニュートリノが必然的に必要となるからである．こうした問題が，ほかの $\Gamma^{(\pm)}$ の選択で回避できるのかどうか調べてみよう.

---

* K. Wilson が最初に提唱したことにより，第 2 項を Wilson 項とよぶ.

(ii) $\Gamma^{(+)}=1,\ \Gamma^{(-)}=0$;

これは $\hat{\psi}_n|0\rangle=0$ の場合である．(4.44)は

$$\sum_n \bar{\psi}_n\gamma_4(\psi_n-\psi_{n-\hat{4}})$$

となる．前と同様，$\bar{\psi}_n=\psi_n{}^*\gamma_4$ とした．ハミルトニアンは時間空間対称性より

$$\hat{H}=\frac{1}{a}\left[\sum_{n,k}\hat{\bar{\psi}}_n\gamma_k(\hat{\psi}_n-\hat{\psi}_{n-\hat{k}})+\sum_n\hat{\bar{\psi}}_n M\hat{\psi}_n\right]$$

ととるべきで，得られる Fermi 作用は

$$S^{(\mathrm{ii})}[\bar{\psi},\psi]=-\sum_{n,\mu}\bar{\psi}_n\gamma_\mu(\psi_n-\psi_{n-\hat{\mu}})-\sum_n\bar{\psi}_n M\psi_n \tag{4.58}$$

となる．

ところで，このときのハミルトニアンは，

$$\hat{H}^\dagger=\frac{1}{a}\left[\sum_{n,k}\hat{\bar{\psi}}_n\gamma_k(\hat{\psi}_{n+\hat{k}}-\hat{\psi}_n)+\sum_n\hat{\bar{\psi}}_n M\hat{\psi}_n\right]\neq H$$

であり，Hermite 性がこわれている．しかし，カイラル対称性の方は，$M=0$ とすれば成立している．

(4.51)を用いると，

$$S_{M=0}{}^{(\mathrm{ii})}=-\int_{-\pi}^{\pi}\frac{d^dp}{(2\pi)^d}\bar{\tilde{\psi}}(p)\sum_\mu\{\gamma_\mu(1-e^{-ip_\mu})\}\psi(p)$$

である．これより，分散関係は，

$$\sum_\mu(1-e^{-ip_\mu})^2=0$$

となる．これは，ナイーヴ Dirac のそれ((4.53)式)，および Wilson 項を含むそれ((4.56)式)に比べて，実数ではなく複素数で与えられている．(Hermite 性がこわれているためである.) これは深刻な困難を生み出すことになる．それをみるために，$M\neq0$ とした分散関係

$$-\sum_\mu(1-e^{-ip_\mu})^2+M^2=M^2+2\sum_\mu\cos p_\mu(1-\cos p_\mu)-2i\sum_\mu\sin p_\mu(1-\cos p_\mu)=0 \tag{4.59}$$

に着目する．$d=2$ とすると，明らかに $p=(p_0,-p_0)$ として $\cos p_0=(1\pm\sqrt{1-M^2})/2$ は(4.59)をみたしている．これに対して，(4.55)では $M\neq 0$ ならば

$$\sum_\mu\left[\sin^2 p_\mu+(1-\cos p_\mu)^2\right]+M^2$$

にはどこにも零点がない．これは Euclid 化の効用であって，(4.24)のときと同様に割り算することが問題なくできて，Fermi 場の伝搬関数

$$S(n,m)=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{d^dp}{(2\pi)^d}e^{ip(n-m)}\frac{\sum_\mu\{-i\gamma_\mu\sin p_\mu+(1-\cos p_\mu)\}+M}{\sum_\mu\{\sin^2 p_\mu+(1-\cos p_\mu)^2\}+M^2} \tag{4.60}$$

が求められるわけである．ところが，Euclid 化したにもかかわらず，(4.59)には零点があり，伝搬関数は定義されていない．Minkowski 表示のとき，(4.26)では $i\epsilon$ によって極をさけることができたが，いまは(4.59)自体が複素数であるのでこの方法も使えず，結局(4.58)は Fermi 場の模型として採用すべきでないことになる．

次に

(iii)　$\Gamma^{(\pm)}=\dfrac{1\pm\gamma_5}{2}$

を考えてみよう．

(4.44)は

$$-\frac{1}{2}\sum_n\left[\bar\psi_n\gamma_4(\psi_{n+\hat 4}-\psi_{n-\hat 4})-\bar\psi_n\gamma_4\gamma_5(\psi_{n+\hat 4}+\psi_{n-\hat 4}-2\psi_n)\right]$$

となり，ハミルトニアンを

$$\hat H=\frac{1}{a}\left[\sum_{n,k}\left\{\frac{1}{2}\hat{\bar\psi}_n\gamma_k(\hat\psi_{n+\hat k}-\hat\psi_{n-\hat k})-\frac{1}{2}\hat{\bar\psi}_n\gamma_k\gamma_5(\hat\psi_{n+\hat k}+\hat\psi_{n-\hat k}-2\hat\psi_n)\right\}\right.$$
$$\left.+\sum_n\hat{\bar\psi}_nM\hat\psi_n\right]$$

ととると，

$$S^{(\mathrm{iii})}[\bar{\psi},\psi] = -\sum_{n,\mu}\left\{\frac{1}{2}\bar{\psi}_n\gamma_\mu(\psi_{n+\hat{\mu}}-\psi_{n-\hat{\mu}})-\frac{1}{2}\bar{\psi}_n\gamma_\mu\gamma_5(\psi_{n+\hat{\mu}}+\psi_{n-\hat{\mu}}-2\psi_n)\right\}-\sum_n\bar{\psi}_n M\psi_n \qquad (4.61)$$

が求まる．これも，カイラル対称性は保つが，Hermite 性をこわす．(すなわち $H\neq H^\dagger$ となる)．ところがこの場合の Hermite 性の破れは，(ii)の場合と異なる結論になる．それをみるには，$d=2$ として，2次元の γ 行列の性質

$$\gamma_\mu\gamma_5 = i\sum_\nu \epsilon_{\mu\nu}\gamma_\nu$$

を用いると，(4.61)の Fourier 変換

$$S^{(\mathrm{iii})} = -\int_{-\pi}^{\pi}\frac{d^2p}{(2\pi)^2}\bar{\tilde{\psi}}(p)[i\gamma_\mu\{\sin p_\mu+\epsilon_{\mu\nu}(1-\cos p_\nu)\}+M]\tilde{\psi}(p)$$

より，分散関係($M=0$ とした)

$$[\sin p_1+(1-\cos p_2)]^2+[\sin p_2-(1-\cos p_1)]^2 = 0$$

には，$p_\mu=(0,0)$ と $p_\mu=(-\pi/2,\pi/2)$ の零点が生じることがわかる．このときの零点は，質量 M を入れてやれば(4.59)と異なり除去できる．M を入れた式で，それぞれの零点のまわりで展開してやれば容易にわかるように，それぞれまったく同じ

$$\sum_\mu p_\mu^2+M^2$$

というかたちをもつからである．こうした事情は，ナイーヴ Dirac 作用での分散関係(4.53)でも同じであり，すなわち，カイラル対称ではあるが粒子重複が起きている．(重複の度合は2個であり，ナイーヴ Dirac の場合の4個にくらべて小さい．)

以上，得られた結果をまとめると以下のようになる．(i)の Hermite であり，カイラル不変でない Wilson 項を含む場合だけが，粒子重複を含まない．ほかの，非 Hermite な場合では，カイラル対称性は保ちつつ一方は伝搬関数が定義されず，一方は粒子重複を起こす．実は，ナイーヴ Dirac 作用のように，

Hermiteであり，かつカイラル対称なFermi場の格子模型は，一般的に粒子重複を起こすことが，Nielsenと二宮によって示されている．ここでは，非Hermiteでカイラル不変なある種の場合は，やはり粒子重複を起こしていることが示されたわけである．こうして，格子場では，ニュートリノはうまく扱えないということになってしまった．

しかし，素粒子物理学で非常な成功を収めている，Weinberg-Salam模型とよばれる弱電磁相互作用を記述する理論の非摂動的な側面の研究には，どうしてもニュートリノを格子に乗せたい．これは今後の問題である．

4-2 補助場の方法

この節では，場の理論を経路積分で扱うとき，しばしば有効である補助場の方法について論じよう．

その本質は，すでに2-3節の(2.106)から(2.110)のところで議論してある．

$$I(g^2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2/2-g^2x^4/8} \tag{2.106}$$

の積分において，Gaussの積分公式

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-(y+igx^2/2)^2/2} \tag{2.108}$$

によって導入した補助変数yをのこしてxの積分を先に行なう．そこで，yについてのWKB近似を行なうと，gについての非摂動効果がとり入れられるというのが補助場の方法の本質である．

これは，場の理論では強力な武器となる．こうした方法が使えるとすれば，摂動ではみえない性質，すなわち前節で議論したような“対称性の自発的破れ”現象がとらえられる可能性があるからである．場の理論では(2.108)のように導入される量のことを，**補助場**(auxiliary field)とよんでいる．

例として，南部-Jona-Lasinio模型といわれる

$$\mathscr{L} = -\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\partial_\mu\psi(x)+g^2[(\bar{\psi}(x)\psi(x))^2-(\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x))^2] \tag{4.62}$$

を考えよう．（くりかえしの添字は，これからは和を表わすものとする.）

(4.62)がカイラル変換(4.57)に関して不変であることはすぐわかる．彼らは，**自己無撞着な手法**(self-consistent method)を用いて，Dirac 場が質量をもつことを示し，前節で少しふれたカイラル対称性の自発的破れが起こっていることを発見した．このことを，ここでは経路積分法の WKB 近似で確かめてみよう．

WKB 近似の範囲内では，連続表示の経路積分を用いることが可能であった．そこで，次の量

$$Z = \int D\psi D\bar{\psi} \exp\left[-\int d^4x \{\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\partial_\mu\psi(x) - g^2[(\bar{\psi}(x)\psi(x))^2 - (\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x))^2]\}\right] \tag{4.63}$$

をわれわれの出発点としよう．もちろん，(4.63)の積分測度は定義されているわけではないが，(2.101)や 2-4 節での議論のように，(4.63)の右辺は

$$\det(\gamma_\mu\partial_\mu + m) \equiv \int D\psi D\bar{\psi} \exp\left[-\int d^4x\, \bar{\psi}(\gamma_\mu\partial_\mu + m)\psi\right] \tag{4.64}$$

で割り算されているとすればよい．しかし，場の理論では(4.64)自体まだきちんと定義されていない．それを行なうには，L^3 を 3 次元体積，T を時間とし

$$\det(\gamma_\mu\partial_\mu + m) \equiv \exp\left[(L^3T)\int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \mathrm{Tr} \ln(i\gamma_\mu p_\mu + m)\right]$$

と書けばよい．ただし，最後の Tr は γ 行列について取るものとし，積分記号の Λ は，積分範囲の上限が Λ で切断されていることを示す．対数関数を$(i\gamma_\mu p_\mu)/m$ で展開し，$(\gamma_\mu p_\mu)^2 = p_\mu{}^2\, 1$, $\mathrm{Tr}\, 1 = 4$ に注意すると，(4.64)は

$$\det(\gamma_\mu\partial_\mu + m) = \exp\left[(L^3T)2\int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \ln(p_\mu{}^2 + m^2)\right] \tag{4.65}$$

と与えられていることになる．こうして，(4.65)で割り算されたものとして，(4.63)をみることにする．

こうした準備の下，(4.63)に補助場 $\sigma(x)$, $\pi(x)$ を，それぞれ $(\bar{\psi}(x)\psi(x))^2$, $(\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x))^2$ を消去するように

$$1 = \int D\sigma \exp\left[-\frac{1}{2}\int d^4x(\sigma(x)+g\bar{\psi}(x)\psi(x))^2\right]$$
$$1 = \int D\pi \exp\left[-\frac{1}{2}\int d^4x(\pi(x)+g\bar{\psi}(x)i\gamma_5\psi(x))^2\right] \tag{4.66}$$

の形で挿入すると($1/\sqrt{2\pi}$ 因子は，$D\sigma$, $D\pi$ に含まれているとする)

$$Z = \int D\psi D\bar{\psi} D\sigma D\pi \exp\left[\int d^4x\left\{-\frac{1}{2}(\sigma(x)^2+\pi(x)^2) - \bar{\psi}(x)(\gamma_\mu\partial_\mu+g\sigma(x)+ig\gamma_5\pi(x))\psi(x)\right\}\right] \tag{4.67}$$

が得られる．Dirac 場の積分は，4 体相互作用のなくなったおかげで遂行できて，(4.67)は

$$Z = \int D\sigma D\pi \exp\left[-\frac{1}{2}\int d^4x(\sigma^2+\pi^2)+\mathrm{Tr}\ln(\gamma_\mu\partial_\mu+g\sigma+ig\gamma_5\pi)\right] \tag{4.68}$$

と書ける．ただし，汎関数行列

$$\det(\gamma_\mu\partial_\mu+g\sigma(x)+ig\gamma_5\pi(x)) \equiv e^{\mathrm{Tr}\ln(\gamma_\mu\partial_\mu+g\sigma+ig\gamma_5\pi)} \tag{4.69}$$ *

を導入し，Tr は，γ 行列と時間・空間すべてについて取ったものとする．

(4.68)を WKB 近似で評価しよう．われわれは基底状態をさがしているので，前節(4.34)での議論のように，$\sigma(x), \pi(x) \to \sigma, \pi$(定数)と考える．

このとき，(4.68)の指数関数の肩は，(4.64), (4.65)より

$$-(L^3T)U(\sigma,\pi) \equiv (L^3T)\left[-\frac{1}{2}(\sigma^2+\pi^2)+2\int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4}\ln\{p_\mu{}^2+g^2(\sigma^2+\pi^2)\}\right] \tag{4.70}$$

と書ける**．$U(\sigma,\pi)$ は，積分範囲を半径 Λ の 4 次元球の内側に制限すれば，

---

* (4.69)の右辺の対数関数は，たとえば，伝搬関数 $(\gamma_\mu\partial_\mu+m)S(x-y) = \delta(x-y)$ を用い，$\gamma_\mu\partial_\mu+m \equiv S^{-1}$ と書けば，

$$\ln[S^{-1}+g\sigma+ig\gamma_5\pi-m] = \ln S^{-1}+\ln[1+S(g\sigma+ig\gamma_5\pi-m)]$$

となることを利用し，第 2 項を展開することで計算できる．しかし，ここでは，こうした議論は必要ない．

** 前と同様に，ln を展開し，

$$\ln(i\gamma_\mu p_\mu+g\sigma+ig\pi\gamma_5) = \ln(g\sigma)+\ln\left(1+\frac{i\gamma_\mu p_\mu+ig\pi\gamma_5}{g\sigma}\right)$$

$\mathrm{Tr}\,\gamma_5=0$，$\mathrm{Tr}\,1=4$ を用いればよい．

初等的にできて

$$U(\sigma,\pi) = \frac{1}{2}\phi^2 - \frac{1}{16\pi^2}\left\{\Lambda^4 \ln\left(1+\frac{g^2\phi^2}{\Lambda^2}\right) - g^4\phi^4 \ln\left(1+\frac{\Lambda^2}{g^2\phi^2}\right) + g^2\phi^2\Lambda^2\right\}$$

$$\phi^2 \equiv \sigma^2+\pi^2 \tag{4.71}$$

となる．（ただし，(4.71)では $U(0,0)=0$ となるように，$\Lambda^4(1/2-\ln\Lambda^2)$ を加えておいた．）

(4.71)が ϕ^2 だけの関数で与えられるのは，カイラル対称性のためである．カイラル変換(4.57)

$$\psi \to e^{i\theta\gamma_5}\psi, \qquad \bar{\psi} \to \bar{\psi}e^{i\theta\gamma_5}$$

は，(4.66)をみれば

$$\sigma \to \sigma\cos 2\theta - \pi\sin 2\theta, \qquad \pi \to \pi\cos 2\theta + \sigma\sin 2\theta$$

と，(σ,π) 空間の回転で表わされている．$\sigma^2+\pi^2 \equiv \phi^2$ が回転不変なのはいうまでもない．

さて，(4.71)の最小値をさがそう．$|\phi| \equiv \sqrt{\phi^2}$ として，

$$\frac{\partial U}{\partial \phi} = \phi - 4g^2\int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4}\frac{\phi}{p_\mu{}^2+g^2\phi^2} = 0 \tag{4.72}$$

がその条件である．（(4.71)を直接微分して求めてもよいが，歴史的な理由からあえてこう書いた．）(4.72)より，$\phi=0$ のほかに，次の式をみたす $\phi=\phi_0$

$$1 = 4g^2\int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4}\frac{1}{p_\mu{}^2+g^2\phi_0{}^2} \tag{4.73}$$

が存在する．(4.73)のことを，**ギャップ方程式**(gap equation)という．前と同様に積分すれば，

$$1 = \frac{g^2}{4\pi^2}\left[\Lambda^2 - g^2\phi_0{}^2\ln\left(1+\frac{\Lambda^2}{g^2\phi_0{}^2}\right)\right]$$

書き直して，

$$\frac{4\pi^2}{g^2\Lambda^2} = 1 - \left(\frac{g^2\phi_0{}^2}{\Lambda^2}\right)\ln\left(1+\frac{\Lambda^2}{g^2\phi_0{}^2}\right) \tag{4.74}$$

が得られる（もちろん，(4.71)を直接微分してもよい）．右辺を，$g^2\phi_0{}^2/\Lambda^2$ の関

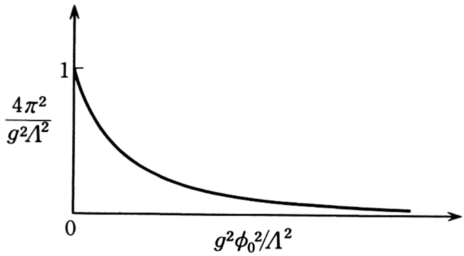


図 4-2 式(4.74)の右辺のグラフ．

数として書いたものが図 4-2 である．これより，結合定数が

$$g^2 \geqq g_c{}^2 \qquad \left(g_c{}^2 \equiv \frac{4\pi^2}{\Lambda^2}\right) \tag{4.75}$$

であれば，$\phi_0 \neq 0$ の解があることがわかる．

カイラル対称性の自由度を用いて

$$\sigma_0 = \phi_0, \qquad \pi_0 = 0 \tag{4.76}$$

とおこう．これが最小値であることは，(4.72)をもう 1 度微分した式において $\phi = \phi_0$ とおいたものが

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial^2 U}{\partial \phi^2}\right|_{\phi_0} &= 1 - 4g^2 \int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{1}{p_\mu{}^2 + g^2\phi_0{}^2} + 8g^4\phi_0{}^2 \int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{1}{(p_\mu{}^2 + g^2\phi_0{}^2)^2} \\ &= 8g^4\phi_0{}^2 \int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{1}{(p_\mu{}^2 + g^2\phi_0{}^2)^2} > 0 \end{aligned} \tag{4.77}$$

(2 行目への変換は(4.73)を用いた)であり，$\sigma = \pi = 0$ とした関係式が

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial^2 U}{\partial \phi^2}\right|_{\sigma=\pi=0} &= 1 - 4g^2 \int_\Lambda \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{1}{p_\mu{}^2} \\ &= 1 - \frac{g^2\Lambda^2}{4\pi^2} < 0 \qquad (g^2 > g_c{}^2) \end{aligned}$$

であることよりわかる．こうして，$g^2 > g_c{}^2$ では，われわれは確かに $\sigma_0 = \phi_0 \neq 0$ を得る．

(4.68)にもどってみると，$\sigma = \phi_0$ は，Dirac 場が質量

$$m = g\phi_0 \tag{4.78}$$

を得たことを意味する．これが，南部たちの発見したことである．

WKB 近似は，これより先は，(4.69)の $\sigma(x)$, $\pi(x)$ を

$$\sigma(x) \equiv \phi_0 + \sigma_q(x), \qquad \pi(x) \equiv \pi_q(x)$$

として，$\sigma_q(x)$, $\pi_q(x)$ に関して展開して，(2.116)のような表式に到達するが，これ以上の議論はここではしない．

いくつか注意をしておこう．(4.77)を π の方向でみると，

$$\left.\frac{\partial^2 U}{\partial \pi^2}\right|_{\phi_0} = 8g^4 \pi_0{}^2 \int_\Lambda \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \left.\frac{1}{(p_\mu{}^2 + g^2 \phi_0{}^2)^2}\right|_{\pi_0=0} = 0$$

であり，π の方向には平坦である．つまり，$U(\sigma, \pi)$ のグラフは，ワインのびんの底のような形(図 4-3)をしている．これは，カイラル対称性のためであり，周期方向(これが π の方向)に平坦であるため，π の質量はゼロである．こうした零質量の粒子の出現が，対称性の自発的破れにはつきもので，**Goldstone 粒子**とよばれている*.

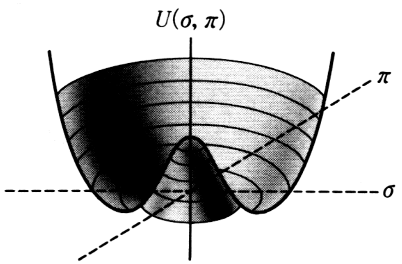


図 4-3 $U(\sigma, \pi)$ の形．一番低いところは円周方向に平坦である．

南部らの自己無撞着な方法に基づく議論は，非摂動的効果を含んでいる．実際，(4.78)を(4.74)に代入して得られる質量と結合定数の関係が $1/g^2$ になっていることより，これが摂動論からは決して求めることのできないものであることは理解できる．われわれの経路積分による解析でも，WKB 法と補助場法との合体により，(2.110)でみたように非摂動効果がとり入れられた．そのため彼らと同じ結果を導き出せたのである．

---

* きちんとした議論は，他の解説を参照せよ．

最後に，補助場の物理的意味を考えてみよう．Gauss 積分

$$\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi a}} e^{-(x-x_0)^2/2a} = 1$$

の被積分関数が $a \to 0$ で δ 関数

$$\lim_{a \to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-(x-x_0)^2/2a} = \delta(x-x_0)$$

となることを思い出すと，(4.66)は

$$\sigma \sim \bar{\psi}\psi, \qquad \pi \sim \bar{\psi}i\gamma_5\psi$$

であることを示唆している．あるいは，(4.67)の指数関数の肩を，ラグランジアンだと思って，Euler-Lagrange 方程式

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \sigma} = 0 = \sigma(x) + g\bar{\psi}(x)\psi(x)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \pi} = 0 = \pi(x) + ig\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$$

を見ることによって，このことは理解されよう．一般に(4.67)のラグランジアンでの，σ, π のように微分項を含まない自由度のことを，補助場という．それは，このように必ず他の自由度でかけているからである．

経路積分法の応用としては，この補助場の方法ほど実用的で役に立つものは，ほかにあまりない．したがって，さまざまな面白い例題がたくさんあるが，紙幅の都合で割愛する．

5 量子モンテカルロ法

前章までに説明した経路積分法が解析的に厳密に実行可能なのは，調和振動子などごくわずかな系に限られる．**WKB** 法や摂動展開が使えるのは，それぞれ古典系に近いか，相互作用が弱い場合に限られる．最近興味をもたれている現象(たとえば高温超伝導など)では，相互作用が強く，量子効果が本質的な役割を果たしている．このような場合には，量子系の経路積分のうちで，もっとも効く部分を数値的に抜き出すのが有効である．これがいわゆる量子モンテカルロ法である．量子モンテカルロ法にもいろいろあるが，あらゆる可能な積分経路の出現確率に応じて等価な古典系を構成し，それに古典系で開発された**重みつき標本抽出法**(importance sampling method)とよばれるモンテカルロ法を適用して物理量を近似的に求める方法を，ここでは主として解説する．

5-1 はじめに

量子統計力学では，密度行列 $\exp(-\beta H)$ のトレースをとると状態和 Z が求まり，その対数をとると

$$f = -k_{\mathrm{B}}T \ln Z = -k_{\mathrm{B}}T \ln \mathrm{Tr} \exp(-\beta H) \tag{5.1}$$

により，系の自由エネルギーが求まる．ただし，$\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$ である．相互作用をしている物理系を表わすハミルトニアン H は一般には対角化が困難なので，適当な正の整数 q に対して

$$H = H_1+H_2+\cdots+H_q \tag{5.2}$$

と分解する．ここで，(5.2)の部分ハミルトニアン $\{H_j\}$ はそれぞれ容易に対角化可能とする．この条件の下でも，ハミルトニアンを $H=H_1+H_2+\cdots+H_q$ と分解する仕方は一意的ではなく，多様である．要は，各々の H_j が容易に対角化でき，$\exp(-\beta H_j)$ の行列要素が求まりさえすればよいのである．したがって，スピン系の場合には，いくつかの格子スピンからなるクラスターを H_j とすることもできる．この方法ではクラスター内のスピン相互作用の非可換性，すなわち量子効果は正しく取り入れられるので，クラスターのサイズが大きいほど近似の精度は上がることになる．もちろん，系全体のハミルトニアン H をそのまま用いて

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\exp(-\beta H) &= \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\frac{1}{n}\beta H\right)\right]^n \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dx_1\int_{-\infty}^{\infty}dx_2\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dx_n\langle x_1|e^{-\frac{1}{n}\beta H}|x_2\rangle \\ &\quad\times\langle x_2|e^{-\frac{1}{n}\beta H}|x_3\rangle\cdots\langle x_n|e^{-\frac{1}{n}\beta H}|x_1\rangle\end{aligned} \tag{5.3}$$

とすれば，近似なしの経路積分表示となる．ただし，$|x_j\rangle$ は，座標表示で系を記述する完全直交系(完備直交系ともいう)である．しかし，(5.3)のままでは，積分要素 $\langle x_j|\exp\left(-\frac{1}{n}\beta H\right)|x_{j+1}\rangle$ を厳密に求めるのが困難である．そもそも，これが厳密に求まるならば，もとの Boltzmann 因子 $\exp(-\beta H)$ に対して $\langle x_\mathrm{i}|\exp(-\beta H)|x_\mathrm{f}\rangle$ を求め，状態和(すなわち母関数)を求めた方が早い．そこで，(5.3)の n (これを **Trotter 数**とよぶ)を十分大きくとって，

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{1}{n}\beta H\right) &= \exp\left[-\frac{1}{n}\beta(H_1+H_2+\cdots+H_q)\right] \\ &= e^{-\frac{1}{n}\beta H_1}e^{-\frac{1}{n}\beta H_2}\cdots e^{-\frac{1}{n}\beta H_q}+O\left(\left(\frac{\beta}{n}\right)^2\right)\end{aligned} \tag{5.4}$$

と近似して，積分要素 $\langle x_j| \exp\left(-\frac{1}{n}\beta H\right)|x_{j+1}\rangle$ をあらわに求める．これは一般化された Trotter 公式(第 1 章の式(1.10)の拡張)

$$e^{x(A_1+A_2+\cdots+A_q)} = \lim_{n\to\infty}(e^{\frac{1}{n}xA_1}e^{\frac{1}{n}xA_2}\cdots e^{\frac{1}{n}xA_q})^n \tag{5.5}$$

の具体的な表示にすぎない．この収束性や代数的一般化については，第 6 章でくわしく議論する．特に高次分解により，$(\beta/n)^m$ ($m=3,4,\cdots$) のオーダーの近似式の作り方が第 6 章で説明される．

5-2 基本的アイディア

さて，座標表示(前節の x 表示)とは限らず，適当な完全直交系(たとえば，スピン系におけるスピン表示) $|\alpha_j\rangle$ を用いて，**部分 Boltzmann 因子**の要素 $\langle\alpha_j| \exp(-\beta H_p/n)|\alpha_k\rangle$ が求まったとすると，一般化された Trotter 公式(5.5)などを用いて，d 次元量子系は，$d+1$ 次元古典系に変換される(これはしばしば Suzuki-Trotter 変換または **ST 変換**とよばれる).

これを一般的に説明する前に，わかりやすくするため，次のような 1 次元トランスバース Ising 模型(1 次元量子スピン系)

$$\begin{aligned} H &= H_1+H_2 \\ H_1 &= -J\sum_{j=1}^{M}\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z, \quad H_2 = -\Gamma\sum_{j=1}^{M}\sigma_j{}^x \end{aligned} \tag{5.6}$$

を考える．ただし，$\sigma_j{}^x, \sigma_j{}^z$ は Pauli 演算子

$$\sigma_j{}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_j{}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.7}$$

を表わす．(5.6)式で，J はスピン間相互作用の強さを表わし，Γ は x 軸方向(トランスバース)の外部磁場を表わす．あるいは，2 つの状態($\sigma_j=\pm1$)間のトンネル効果を表わしていると解釈してもよい．すなわち，$\sigma_j{}^z$ の固有状態 $|+1\rangle_j, |-1\rangle_j$ ($\sigma_j{}^z|\pm1\rangle=\pm|\pm1\rangle$) の間の遷移確率が $|\langle+1|\Gamma\sigma_j{}^x|-1\rangle_j|^2=\Gamma^2$ で与えられ，しかも，J の相互作用によって，隣り同士が $J>0$ なら同じ状態

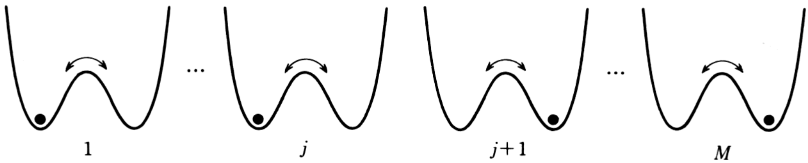


図 5-1 ハミルトニアン(5.6)に対応する物理系．1次元上に2重井戸のポテンシャルが並び，互いに相互作用しながらトンネル効果で左右に移り変わる．

をとりやすくなっているような体系である．

要するに，図5-1のような物理系を記述するハミルトニアンが(5.6)である．この系の状態和Zは，Trotter公式(5.5)を用いて，次のように，2次元Ising模型の状態和として表現することができる．まず，状態和Zは$K\equiv\beta J$，$\gamma\equiv\beta\Gamma$とおいて

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} = \mathrm{Tr}\exp\Bigl(K\sum_{j=1}^{M}\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z+\gamma\sum_{j=1}^{M}\sigma_j{}^x\Bigr) \tag{5.8}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\{\sigma_{jk}=\pm1\}}\langle\{\sigma_{j1}\}|e^{A/n}|\{\sigma_{j1}'\}\rangle\langle\{\sigma_{j1}'\}|e^{B/n}|\{\sigma_{j2}\}\rangle \\
&\quad\times\langle\{\sigma_{j2}\}|e^{A/n}|\{\sigma_{j2}'\}\rangle\langle\{\sigma_{j2}'\}|e^{B/n}|\{\sigma_{j3}\}\rangle \\
&\quad\times\cdots\cdots\cdots\cdots \\
&\quad\times\langle\{\sigma_{jn}\}|e^{A/n}|\{\sigma_{jn}'\}\rangle\langle\{\sigma_{jn}'\}|e^{B/n}|\{\sigma_{j1}\}\rangle
\end{aligned} \tag{5.9}$$

ただし，

$$A\equiv K\sum_{j=1}^{M}\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z,\qquad B\equiv\gamma\sum_{j=1}^{M}\sigma_j{}^x \tag{5.10}$$

また$|\{\sigma_{jk}\}\rangle$はM個のスピン系の直積空間$|\{\sigma_{jk}\}\rangle=|\sigma_{1k}\rangle\otimes|\sigma_{2k}\rangle\otimes\cdots\otimes|\sigma_{Mk}\rangle$の$n$個の組($k=1,2,\cdots,n$)を表わし，

$$\sigma_j{}^z|\{\sigma_{jk}\}\rangle=\sigma_{jk}|\{\sigma_{jk}\}\rangle \tag{5.11}$$

である．$|\{\sigma_{jk}'\}\rangle$もまったく同様である．演算子Aは，この表示では，対角的であるから，Kroneckerのデルタ関数$\delta(x,y)$ ($x=y$のとき1，$x\neq y$のとき0をとる関数)を用いて，その指数演算子$e^{A/n}$の要素は，kを指定しておくと

$$\langle\{\sigma_{jk}\}|e^{A/n}|\{\sigma_{jk}'\}\rangle=\exp\Bigl(\frac{K}{n}\sum_{j=1}^{M}\sigma_{jk}\sigma_{j+1,k}\Bigr)\prod_{j=1}^{M}\delta(\sigma_{jk},\sigma_{jk}') \tag{5.12}$$

となる．また，指数演算子 $e^{B/n}$ の要素は

$$\langle\{\sigma_{jk}\}|e^{B/n}|\{\sigma_{j,k+1}\}\rangle = a_n{}^M \exp\left(\gamma_n \sum_{j=1}^{M} \sigma_{jk}\sigma_{j,k+1}\right) \tag{5.13}$$

と書ける．ただし

$$a_n \equiv \left\{\frac{1}{2}\sinh\left(\frac{2\gamma}{n}\right)\right\}^{1/2}, \qquad \gamma_n \equiv \frac{1}{2}\ln\coth\left(\frac{\gamma}{n}\right) \tag{5.14}$$

である．なぜなら，

$$\langle\{\sigma_{jk}\}|e^{B/n}|\{\sigma_{j,k+1}\}\rangle = \prod_{j=1}^{M} \langle\sigma_{jk}|\exp\left(\frac{\gamma}{n}\sigma_j{}^x\right)|\sigma_{j,k+1}\rangle \tag{5.15}$$

であり，1つずつの Pauli 行列の指数演算子 $\exp\left(\dfrac{\gamma}{n}\sigma^x\right)$ の行列要素 $\langle\sigma|\exp\left(\dfrac{\gamma}{n}\sigma^x\right)|\sigma'\rangle$ に帰着され，しかも，これは，$\theta=\gamma/n$ とおき，$\sigma=\pm1$，$\sigma'=\pm1$ とすると

$$\begin{aligned}
\langle\sigma|\exp(\theta\sigma^x)|\sigma'\rangle &= \langle\sigma|\cosh\theta+\sigma^x\sinh\theta|\sigma'\rangle \\
&= (\cosh\theta)\langle\sigma|\sigma'\rangle+(\sinh\theta)\langle\sigma|\sigma^x|\sigma'\rangle \\
&= (\cosh\theta)\times\frac{(\sigma+\sigma')^2}{4}+(\sinh\theta)\times\frac{(\sigma-\sigma')^2}{4} \\
&= \frac{1}{2}(e^{\theta}+e^{-\theta}\times\sigma\sigma') \\
&= a_n\exp(\gamma_n\sigma\sigma')
\end{aligned} \tag{5.16}$$

が成立するからである．(5.16)の最後の表式は，$\sigma\sigma'=1$ とおいて得られる式 $\cosh\theta=a_n\exp(\gamma_n)$ と，$\sigma\sigma'=-1$ とおいて得られる式 $\sinh\theta=a_n\exp(-\gamma_n)$ の2つの式を，a_n と γ_n について解いて得られる．こうして，1次元量子スピン系の状態和 Z は(5.9)に(5.12)と(5.13)を代入して

$$Z = \lim_{n\to\infty} a_n{}^{Mn} \sum_{\{\sigma_{jk}=\pm1\}} \exp\left\{\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{K}{n}\sigma_{jk}\sigma_{j+1,k}+\gamma_n\sigma_{jk}\sigma_{j,k+1}\right)\right\} \tag{5.17}$$

となり，図5-2のような2次元 Ising 模型の状態和によって表わされる．

このことからも類推されるように，じつは，次の定理が成り立っているのである．

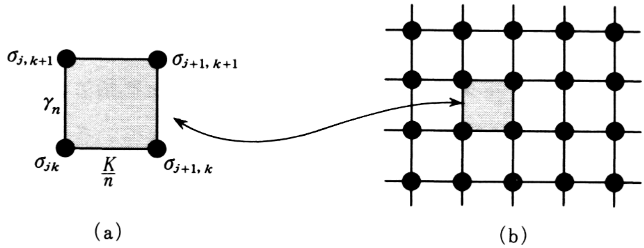


図 5-2 (a)の各格子点には，Ising スピン σ_{jk} が対応する．(a)を1つのセルとする2次元 Ising 格子(b)が1次元トランスバース Ising 模型と等価になる．

等価定理 短距離相互作用をしている d 次元量子系は，同様に短距離相互作用をしている $d+1$ 次元古典系に変換される．▌

この定理は，次のことからわかる．一般に，状態和 Z は

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{Tr}\exp\{-\beta(H_1+H_2+\cdots+H_q)\} \\ &= \lim_{n\to\infty}\mathrm{Tr}\left\{\exp\left(-\frac{\beta}{n}H_1\right)\exp\left(-\frac{\beta}{n}H_2\right)\cdots\exp\left(-\frac{\beta}{n}H_q\right)\right\}^n \\ &= \lim_{n\to\infty}\sum_{\alpha_1}\cdots\sum_{\alpha_{nq}}\langle\alpha_1|\rho_1|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\rho_2|\alpha_3\rangle\cdots\langle\alpha_q|\rho_q|\alpha_{q+1}\rangle \\ &\quad\times\langle\alpha_{q+1}|\rho_1|\alpha_{q+2}\rangle\cdots\langle\alpha_{nq}|\rho_q|\alpha_1\rangle \\ &\equiv \mathrm{Tr}^{(d+1)}\exp\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}{}^{(d+1)} \end{aligned} \tag{5.18}$$

と書き表わせる．ただし $\rho_j\equiv\exp(-\beta H_j/n)$ であり，さらに，

$$\langle\alpha_q|\exp(-\beta H_j/n)|\alpha_{q+1}\rangle = \exp H_j(\alpha_q, \alpha_{q+1}) \tag{5.19}$$

と書いて，有効ハミルトニアンを

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathrm{eff}}{}^{(d+1)} &= H_1(\alpha_1,\alpha_2)+H_2(\alpha_2,\alpha_3)+\cdots+H_q(\alpha_q,\alpha_{q+1}) \\ &\quad+H_1(\alpha_{q+1},\alpha_{q+2})+H_2(\alpha_{q+2},\alpha_{q+3})+\cdots+H_q(\alpha_{2q},\alpha_{2q+1}) \\ &\quad\quad\cdots\cdots\cdots\cdots \\ &\quad+H_1(\alpha_{(n-1)q+1},\alpha_{(n-1)q+2})+\cdots+H_q(\alpha_{nq},\alpha_1) \end{aligned} \tag{5.20}$$

で定義した．α の添字のために，次元が1つ増えていることに注意しよう．ここで，$\{H_j\}$ が短距離相互作用のときは，上の $d+1$ 次元の有効ハミルトニアンも短距離相互作用になることが，先の例では明らかであろう．

もとにもどって，$n\to\infty$ の極限をとれば，1次元量子スピン系の厳密解が得

られる．同様に，d 次元トランスバース Ising 模型は $d+1$ 次元 Ising 模型に等価になる．しかし，$d \geqq 2$ では，現在どちらも厳密には解かれてはいないので，近似的に解くか，コンピューターシミュレーションに頼るしかない．後者の方法では，次元数は多くなっても古典的な表示になっていることが本質的に重要である．

このようにして，d 次元量子系を $d+1$ 次元古典系に ST 変換すれば，その変換した古典系に従来のモンテカルロ法を適用することができる．これが，1976年に鈴木によって提唱された**量子モンテカルロ法**(quantum Monte Carlo method)の一般論の基本的なアイディアである*．勿論，ST 変換された古典系は，通常の古典系と異なり，多体力が現われることが多く，また，反強磁性相互作用の場合には，ST 変換された行列要素が負になったりするため**，量子モンテカルロ法特有の工夫が必要になる．特に，フラストレートした(すなわち，反強磁性3角格子のように基底状態でもスピンの向きが互いに矛盾して決まらない)スピン系では，負の行列要素，すなわち，負の部分 Boltzmann 因子の効果が格子全体でも残り***，量子モンテカルロ法の精度を悪くしている．これは**負符号問題**とよばれ，量子モンテカルロ法の中で残された最も困難な問題の1つであり，現在，世界中の多くの人々がこの難問に挑戦している．

5-3 量子効果と重みつき標本抽出法

前節で説明したように，d 次元量子系を $d+1$ 次元古典系に変換し，その変換された古典系をモンテカルロ法でシミュレートするわけであるが，その場合に量子効果がいかにシミュレーションにとりこまれるかを説明しよう．

わかりやすくするために，ふたたび，まず1次元トランスバース模型について議論する．図5-2の(b)で，各格子点上のスピンが $+1$ なら黒丸，-1 なら

---

* 図5-4とそこに引用されている文献参照．

** (5.25)の第1式は，$J_x<0$ のとき，$\sigma_j=-\sigma_j^{(1)}$，$\sigma_{j+1}=-\sigma_{j+1}^{(1)}$ に対して負となる．

*** 図5-5の世界線の重みの中には，フラストレーションのため負符号の積が奇数回となり，負となるものも現われる．

白丸で表わし，その代表的な例を示すと図5-3のようになる．図5-3で横方向がスピンの並んでいる実空間の方向を表わしている．すなわち，図5-3の横方向の1列が図5-1の系に対応しており，ポテンシャルの右側にあれば黒丸で表わし，左側にあれば白丸で表わす．トンネル効果で別の状態に移る様子を時々刻々と電光掲示板に表わすように表現するため，Trotter方向の軸が用いられている．いわば，時間変化(このTrotter方向の変化が量子効果を表わしている)を2次元平面に同時に映し出したことになる．したがって，この拡大された$1+1=2$次元空間の1つの配位(図5-3の黒白の分布の1つが1つの配位を表わし，図の例は1つの配位の例である)が経路積分(いまの問題では経路和)の1つの経路を表わしている．したがって，いろいろな経路を作り，その出現確率をかけて足し合わせることは，この問題では，図5-3の白黒の配位をランダムに変えていき，その出現確率をかけて和をとることに対応する．つまり，この等価な2次元Ising模型の状態和をモンテカルロ法によって求めればよい．それには，白と黒の丸を変化させる際に，重みの大きい配位がそれらの出現確率に比例して現われるように標本抽出する．これが**重みつき標本抽出法**である．国勢調査などの統計処理と同様に，標本の数は，全体の配位の数(図5-3では，2^{Mn})に比べ，ほんのわずかでよいため，実空間の大きさMは，厳密な対角化を行なう場合に比べてはるかに大きい数にできる点が，モンテカルロシミュレーションの利点の1つである．

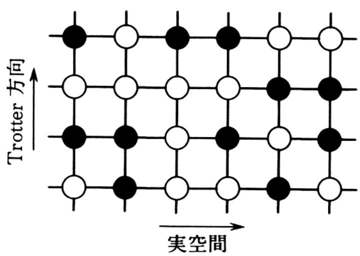


図5-3 等価な格子上でのスピンの配位．黒丸が$+1$スピン，白丸が-1スピンを表わしている．

5-4 量子スピン系への応用

この節では，1次元および2次元の Heisenberg 模型の量子モンテカルロ法について解説する．

a) 1次元 Heisenberg 模型

1次元 Heisenberg 模型を拡張して，次のハミルトニアンで記述される異方的 Heisenberg 模型

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{j=1}^{N} H_{j,j+1} \\
H_{j,j+1} &= -(J_x\sigma_j{}^x\sigma_{j+1}{}^x + J_y\sigma_j{}^y\sigma_{j+1}{}^y + J_z\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z)
\end{aligned}
\tag{5.21}
$$

を考えよう．この系に等価定理を適用する場合には，(5.2)のように，全体のハミルトニアンを部分ハミルトニアンに分割する必要があるが，その分割は，前にも述べたとおり，一意的ではない．(5.21)式のように，$H_{j,j+1}$ を部分ハミルトニアンとして N 個に分割することもできるし，また，

$$
H_1 = -J_x\sum_{j=1}^{N}\sigma_j{}^x\sigma_{j+1}{}^x, \qquad H_2 = -J_y\sum_{j=1}^{N}\sigma_j{}^y\sigma_{j+1}{}^y, \qquad H_3 = -J_z\sum_{j=1}^{N}\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z
\tag{5.22}
$$

として $H=H_1+H_2+H_3$ のように分割することもできる．なぜなら，前者の分割では，$H_{j,j+1}$ は2個のスピン系の Hamilton 行列($2^1\times 2^1=4$ 行4列の行列)であるから，対角化することも，その行列要素をあらわに求めることも容易にできるし，後者の分割でも，H_1, H_2, H_3 はそれぞれ，$\{\sigma_j{}^x\}, \{\sigma_j{}^y\}, \{\sigma_j{}^z\}$ を対角化した表示で対角化されているからである．

実際，量子モンテカルロ法の ST 変換で基本的な役割を果たす部分 Boltzmann 因子 $\rho_{j,j+1}=\exp(-\beta H_{j,j+1}/n)$ の行列要素を調べてみると，次のようになる．すなわち，$\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z$ の固有関数 $|\sigma_j, \sigma_{j+1}\rangle$ (ただし，$\sigma_j=\pm 1, \sigma_{j+1}=\pm 1$，および $\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z|\sigma_j, \sigma_{j+1}\rangle=\sigma_j\sigma_{j+1}|\sigma_j, \sigma_{j+1}\rangle$) を用いて，可換性

$$[\sigma_j{}^x\sigma_{j+1}{}^x, \sigma_j{}^y\sigma_{j+1}{}^y] = [\sigma_j{}^y\sigma_{j+1}{}^y, \sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z] = [\sigma_j{}^z\sigma_{j+1}{}^z, \sigma_j{}^x\sigma_{j+1}{}^x] = 0 \tag{5.23}$$

に注意すると*

$$\begin{aligned}\langle\sigma_j, \sigma_{j+1}|\rho_{j,j+1}|\sigma_j', \sigma_{j+1}'\rangle = &\sum_{\{\sigma_j{}^{(k)}=\pm1,\, \sigma_{j+1}{}^{(k)}=\pm1\}}\langle\sigma_j, \sigma_{j+1}|\rho_{j,j+1}{}^{(x)}|\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(1)}\rangle\\ &\times\langle\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(1)}|\rho_{j,j+1}{}^{(y)}|\sigma_j{}^{(2)}, \sigma_{j+1}{}^{(2)}\rangle\\ &\times\langle\sigma_j{}^{(2)}, \sigma_{j+1}{}^{(2)}|\rho_{j,j+1}{}^{(z)}|\sigma_j', \sigma_{j+1}'\rangle\end{aligned} \tag{5.24}$$

と書ける．ただし，$\rho_{j,j+1}{}^{(k)}=\exp\left(\frac{1}{n}\beta J_k\sigma_j{}^k\sigma_{j+1}{}^k\right)$ $(k=x, y, z)$ である．さらに，それぞれの行列要素は，

$$\begin{aligned}\langle\sigma_j, \sigma_{j+1}|\rho_{j,j+1}{}^{(x)}|\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(1)}\rangle &= \langle\sigma_j, \sigma_{j+1}|\cosh(\beta J_x/n)\\ &\quad+\sigma_j{}^x\sigma_{j+1}{}^x\sinh(\beta J_x/n)|\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(1)}\rangle\\ &= \cosh(\beta J_x/n)\delta(\sigma_j, \sigma_j{}^{(1)})\delta(\sigma_{j+1}, \sigma_{j+1}{}^{(1)})\\ &\quad+\sinh(\beta J_x/n)\delta(\sigma_j, -\sigma_j{}^{(1)})\delta(\sigma_{j+1}, -\sigma_{j+1}{}^{(1)})\\ \langle\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(1)}|\rho_{j,j+1}{}^{(y)}|\sigma_j{}^{(2)}, \sigma_{j+1}{}^{(2)}\rangle &= \cosh(\beta J_y/n)\delta(\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_j{}^{(2)})\delta(\sigma_{j+1}{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(2)})\\ &\quad-\sinh(\beta J_y/n)\sigma_j{}^{(1)}\sigma_{j+1}{}^{(1)}\delta(\sigma_j{}^{(1)}, -\sigma_j{}^{(2)})\\ &\quad\times\delta(\sigma_{j+1}{}^{(1)}, -\sigma_{j+1}{}^{(2)})\\ \langle\sigma_j{}^{(2)}, \sigma_{j+1}{}^{(2)}|\rho_{j,j+1}{}^{(z)}|\sigma_j', \sigma_{j+1}'\rangle &= \{\cosh(\beta J_z/n)+\sigma_j'\sigma_{j+1}'\sinh(\beta J_z/n)\}\\ &\quad\times\delta(\sigma_j{}^{(2)}, \sigma_j')\delta(\sigma_{j+1}{}^{(2)}, \sigma_{j+1}')\end{aligned} \tag{5.25}$$

と表わせる．ただし，$\delta(x, y)$ は Kronecker のデルタ関数である．これらの積をとり，$\sigma_j{}^{(1)}, \sigma_{j+1}{}^{(1)}, \sigma_j{}^{(2)}, \alpha_{j+1}{}^{(2)}$ で和をとり，全体を行列の形にまとめると，少し面倒な計算の後に

$$\begin{aligned}\rho_{j,j+1} &= (\langle\sigma_j, \sigma_{j+1}|\rho_{j,j+1}|\sigma_j', \sigma_{j+1}'\rangle)\\ &= a\begin{pmatrix}1+X_3 & 0 & 0 & X_1-X_2\\ 0 & 1-X_3 & X_1+X_2 & 0\\ 0 & X_1+X_2 & 1-X_3 & 0\\ X_1-X_2 & 0 & 0 & 1+X_3\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{5.26}$$

---

* しかし，$\sigma_{j-1}{}^x\sigma_j{}^x$ と $\sigma_j{}^y\sigma_{j+1}{}^y$ 等は可換でないため，H_1, H_2, H_3 は互いに非可換である．

となる*．ただし，$K_x=\beta J_x/n$，$K_y=\beta J_y/n$，$K_z=\beta J_z/n$ とおいて，

$$a = \cosh K_x \cosh K_y \cosh K_z - \sinh K_x \sinh K_y \sinh K_z$$

$$X_1 = \frac{\tanh K_x - \tanh K_y \tanh K_z}{1-\tanh K_x \tanh K_y \tanh K_z}, \quad X_2 = \frac{\tanh K_y - \tanh K_z \tanh K_x}{1-\tanh K_x \tanh K_y \tanh K_z}, \quad \cdots \tag{5.27}$$

の記号を用いた．

さて，上の表示(5.24)と(5.25)または行列表示(5.26)からわかるように，部分 Boltzmann 因子 $\langle \sigma_j, \sigma_{j+1} | \rho_{j,j+1} | \sigma_j', \sigma_{j+1}' \rangle$ は，Ising スピン変数 $(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma_j', \sigma_{j+1}')$ の反転 $(\{\sigma_j\} \to \{-\sigma_j\})$ に対して不変である．したがって，それは，これらの変数の偶数個の積だけの関数となる．このことは，その対数をとった関数に対しても成立する．こうして，

$$\langle \sigma_j, \sigma_{j+1} | \rho_{j,j+1} | \sigma_j', \sigma_{j+1}' \rangle = C \exp(H_2(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma_j', \sigma_{j+1}') + K_4 \sigma_j \sigma_{j+1} \sigma_j' \sigma_{j+1}') \tag{5.28}$$

と書ける．ただし，C は適当な定数，H_2 は $\sigma_j\sigma_{j+1}$, $\sigma_j'\sigma_{j+1}'$, $\sigma_j\sigma_j'$, $\sigma_{j+1}\sigma_{j+1}'$, $\sigma_j\sigma_{j+1}'$, $\sigma_{j+1}\sigma_j'$ の適当な 1 次結合で表わされる．すなわち．これは Ising スピンの 2 体力である．K_4 の項は，4 体力を表わしている．この両方の相互作用をまとめて，図 5-4 の(a)のように陰影を施した 4 辺形で表わすことにする．この 4 辺形を順次，図 5-4 の(b)のように並べていくと，もとの 1 次元量子

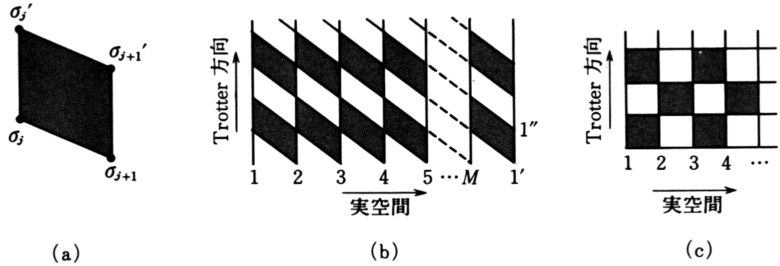


図 5-4 (a) 単位セルに 4 体力がはたらく．(b) 1 次元量子 Heisenberg 模型と等価な 4 体力 Ising 模型(5.28)，(c) もう 1 つの等価な格子．(M. Suzuki : Prog. Theor. Phys. **56**(1976)1454 より転載.)

* 上の表示のベクトルの成分は (1, 1), (−1, 1), (1, −1), (−1, −1) の順に並べた．

Heisenberg 模型に等価な 2 次元 Ising 格子が作れる．(5.21)や(5.22)の分割の他に，次のような分割の仕方もある．すなわち，

$$H = H^{(\mathrm{o})} + H^{(\mathrm{e})}$$

ただし

$$H^{(\mathrm{o})} = \sum_{j=1} H_{2j-1,2j}, \qquad H^{(\mathrm{e})} = \sum_{j=1} H_{2j,2j+1} \tag{5.29}$$

と 2 つに分ける．これを前と同様に ST 変換すると，図 5-4 の(c)図のような等価な 2 次元 Ising 格子となる．こんども前と同様，陰影の部分は 4 体力となるが，このチェッカーボード格子の方が便利なため，実際はもっぱら，こちらの等価格子が用いられている．もっとも，(c)図を 45° 回転すれば，(b)の格子になる．

実際にこの ST 変換された模型に，Metropolis のモンテカルロ法等を適用してみると，量子モンテカルロ法特有の興味深い情況が現われる．説明の便宜上，図 5-4 の(c)図の場合について，等方的 XY 模型や Heisenberg 模型を考えると，これらの相互作用では，$\sum \sigma_j{}^z$ が保存されるから，(5.25)や(5.26)の表示からもわかるように，等価な Ising 模型の各 1 列上の格子点の σ_j の和は一定である．したがって，図 5-5 のように，上向きスピンだけを太線で結び，世界線と名づけると，この世界線を変化させることによって*，等価 Ising 模型の配位の標本抽出が可能となる．この系の経路和のすべての経路は，これら

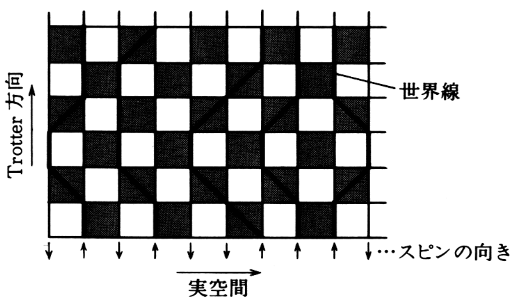


図 5-5 等価格子上での上向きスピンの変化の様子(これを世界線とよぶ)．

* トレースの条件から，Trotter 方向には周期境界条件が課される．

世界線の集合として記述される．これらの世界線に関する重みつき(世界線)標本抽出法によって系のエネルギー，比熱，磁化率等が求められており，絶対零度のごく近傍を除けば，厳密解とよく一致した結果が得られている．このことは，上に説明した量子モンテカルロ法の有効性を示している．そこで次項において厳密解のない 2 次元スピン系の量子モンテカルロ法を説明する．

b) 2 次元 *XY* 模型および Heisenberg 模型の相転移

前項と同様にして 2 次元 *XY* 模型や Heisenberg 模型は，(5.16)または(5.18)の 4 体力 Ising 模型の表示を用いて図 5-6 の(a)，(b)または(c)のような 4 体力 Ising 模型に ST 変換される*．この ST 変換された Ising 系に Metropolis のモンテカルロ法を応用し，**2 次元 *XY* 模型**($J_x=J_y$, $J_z=0$)の熱力学的性質を調べてみると，この量子系でも，2 次元**古典平面回転子模型**で発見された **Kosterlitz-Thouless 転移**が起こることが数値的に確かめられた．すなわち，有限温度で自発磁化は現われず，比熱も温度の関数として滑らかで発散せず，磁化率が $k_B T_c \cong J$ のオーダーの温度で発散する．よって，量子効果をとり入れた量子モンテカルロ法を用いて，この相転移の問題では本質的には量子効果が効かないことを示したことになる．

同様にして，2 次元 Heisenberg 模型の比熱や磁化率を，この量子モンテカ

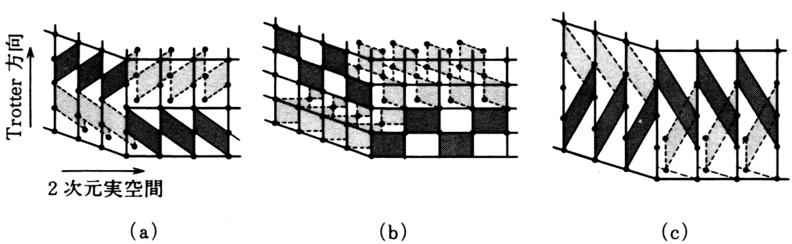


図 5-6 2 次元量子スピン系と等価な 3 次元多体力 Ising 模型の 3 つの型．
(M. Suzuki : Prog. Theor. Phys. **56**(1976)1454 より転載.)

* (a)では，2 次元実空間の相互作用(ボンド)をまず横方向に分割し，次に縦方向に分割し，これをくり返す．(b)では，横方向も縦方向も(5.29)のように偶奇のボンドに分割する．(c)では，ボンドごとに縦，横，縦，横，… と分割する．

ルロ法で調べてみると，有限温度では発散せず，相転移が起こらないことが数値実験でも確かめられた．

5-5 効用と将来性

以上に解説したとおり，量子系を ST 変換により古典系に写像し，古典系の研究のために開発されたモンテカルロ法等を量子系にも適用できるようにしたことによって，量子系の計算機実験が急速に進展した．前節の応用例では，代数的にはもっとも簡単な Trotter 公式を用いて具体的な表示を求めた．第 6 章ではもっと高い精度の分解法を代数的に研究する．

今後，量子スピン系や Fermi 系のモンテカルロシミュレーションが大いに実行されて，それらの系での物理的性質が解明され，新しい興味ある現象が発見されることを期待したい．特に，強相関のある系，たとえば，Hubbard 模型での電子状態や高温超伝導のメカニズムの解明が行なわれることが望まれる．

6 代数的一般化

前章までの経路積分法は，Trotter 公式(1.10)に基づいており，時間分割 Δt のオーダーで正しい値に近づく．これまでの定性的な議論では，$\Delta t \to 0$ の極限をとるので，第1近似の Trotter 公式で十分であったが，強く相互作用している量子系の問題を定量的に扱うには，前章の量子モンテカルロ法のように，有限の Δt に対して数値解析的手法に頼らなければならない場合が多い．このような場合には，通常の Trotter 公式を一般化した高次分解法が有効である．この章では，経路積分法の代数的一般化を説明する．この代数的に一般化された公式に第4章までの具体的な積分表示を適用すれば，高い精度の経路積分が求められることになる．精度をあげることによって現象の本質が見えてくるような場合には，この高次分解法は特に重要となる．さらに，この章で解説するような代数的に一般化した指数演算子高次分解の公式は，経路積分法だけでなく，Hamilton 系の非線形動力学等，他の多くの問題に応用できる．

6-1 はじめに

第1章で議論したように，時刻 t における量子状態 $|\psi(t)\rangle$ は Schrödinger 方

程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{6.1}$$

の解

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{t}{i\hbar}H\right)|\psi(0)\rangle \tag{6.2}$$

によって形式的に与えられる．ただし，H は系のハミルトニアンを表わす．通常，H は運動エネルギーを表わす演算子 K とポテンシャルエネルギーを表わす演算子 V の和

$$H = K+V \tag{6.3}$$

として表わされ，K と V は互いに非可換である．すなわち，

$$[K, V] = KV-VK \neq 0 \tag{6.4}$$

である．K と V の具体的な内容に関しては，前章までに豊富な例が示されているので参照して頂きたい．

量子統計力学では，波動関数 $|\psi(t)\rangle$ ではなく，熱平衡状態を記述する密度行列 ρ を用いる．これは，温度 T の逆数 $\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$（ただし k_{B} は Boltzmann 定数を表わす）を変数にした方程式

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\rho = -H\rho \tag{6.5}$$

の解

$$\rho(\beta) = e^{-\beta H}\rho(0) = e^{-\beta H} \tag{6.6}$$

として形式的に与えられる．ただし，$\beta=0$（$T=\infty$）では，体系はまったく乱雑で，どの状態も等確率で実現されるので $\rho(0)=1$（単位演算子）とした．H は再び非可換な演算子 $H_1, H_2, \cdots$ の和として表わされることが多い．

また，第7章で説明するように，確率過程を記述する方法として分布関数の方法があるが，これは，確率変数 x が時刻 t で実現される確率 $P(x, t)$ に対する偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = LP(x,t) \tag{6.7}$$

の形で与えられる．ここで，L は，x に関する微分を含む線形演算子である．変数 x としては，1変数の場合だけでなく，多変数または無限変数になることも多い．いちばん簡単な例として，1次元変数 x で記述される粒子がポテンシャル $V(x)$ の中を拡散する現象を表わす次の Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{dV(x)}{dx}\right)+D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]P(x,t) \tag{6.8}$$

をあげることができる．上式の第1項は，ポテンシャル $V(x)$，すなわち，力 $F=-dV(x)/dx$ の中での力学的運動を表わすので，ドリフト項とよばれる．第2項は，拡散係数 D で特徴づけられる拡散を記述する項であり，拡散項とよばれる．(6.8)の解は，形式的には，**指数演算子** $\exp\{t(A+B)\}$ を用いて

$$P(x,t) = e^{t(A+B)}P(x,0) \tag{6.9}$$

と書かれる．A はドリフト項，B は拡散項を表わす演算子で，それぞれ(6.8)の右辺の[　]の中の演算子である．第7章で議論するように，A,B のどちらか一方だけならば，この問題は厳密に解析的に解くことができて，演算 e^{tA} や e^{tB} はあらわに実行できるが，A と B が両方あると，これらは互いに非可換であり，演算 $e^{t(A+B)}$ を解析的に行なうのは一般に困難である．

古典力学においては，座標 $\{q_j\}$，運動量 $\{p_j\}$ は，次の Hamilton 方程式

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \qquad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \tag{6.10}$$

に従う．ただし，系の自由度を f とすると，$j=1,2,\cdots,f$ である．また，古典系のハミルトニアン H は

$$H = K(\{p_j\})+V(\{q_j\}) \tag{6.11}$$

と書けることが多い．いま，(6.10)をコンパクトに表現するため，$\{q_j\}$ と $\{p_j\}$ をまとめてベクトル記号 $\boldsymbol{X}$ で表わすことにすると，(6.10)は，

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{X} = A[\boldsymbol{X}]+B[\boldsymbol{X}] \tag{6.12}$$

のように書くことができる．第1項は，運動エネルギー $K(\{p_j\})$ に由来する項であり，第2項はポテンシャルエネルギー $V(\{q_j\})$ に由来する項である．両方とも非線形演算子である．その非線形性を強調するために，［　］を用いて，$A[\boldsymbol{X}], B[\boldsymbol{X}]$ と書いたが，これらの和は $(A+B)[\boldsymbol{X}]$ と書くことができるから，(6.12)の解は，前と同様，形式的には，

$$\boldsymbol{X}(t) = e^{t(A+B)}\boldsymbol{X}(0) \tag{6.13}$$

と書ける．しかし，指数演算子 $e^{t(A+B)}$ は非常に複雑な操作を表現している．勿論この場合でも，部分的な指数演算子 e^{tA} や e^{tB} は比較的簡単な演算である．

以上に見られるように，一見違った問題も代数的に表現してみるとまったく類似の構造をもっていることは極めて興味深いことである．第1章から第5章まででは要するに，この代数的表現を，完全直交系を用いて具体的実用的に表示し，興味深い問題に応用する解析的計算法(第4章まで)，または数値的計算法(第5章)を解説したのである．これを模式的に示すと図6-1のようになる．

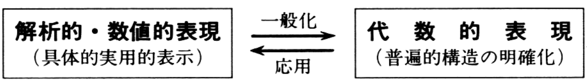


図6-1　代数的構造と表示法との関係

すなわち，図6-1からわかるように，同じ代数的構造の公式を利用する場合でも，第1章で説明したように，Weylの順序付け(中点処方)を用いた位相空間経路積分公式，コヒーレント表示，Fermi系に対するGrassmann数を用いた経路積分公式等と，問題に応じていろいろと工夫をする必要がある．

この章でこれから解説する代数的一般化の問題では，以上のような具体的表示をとらない限り，積分記号や区分求積の和記号は一切出てこない．しかし，以上に説明したとおり，この章は，経路積分法の本質を代数的に浮き彫りにするものである．計算機の今後のスピード化と大型化にともなって，高精度の数値的経路積分はますます重要な役割を果たすようになるだろう．そのとき，この章の指数演算子高次分解の公式が今後大いに役立つものと期待される．

6-2 Trotter 公式の一般化

前節で説明したとおり，多くの問題の解が指数演算子 $e^{x(A+B)}$ を用いて表わされるが，その解の具体的な振舞いと特徴を知るには，この演算を近似的にでも実行しなければならない．その際，次の 2 つの点が重要なポイントになる．

(1) もとの指数演算子の対称性(すなわち，ユニタリー性，symplectic な性質等)をできる限り保存するような近似を行なうこと．

(2) 有限の時間分割 Δt，または一般の x 分割 Δx に対して，できるかぎり高次までとりこんだ精度の高い近似法を開発すること．

(1)については，たとえば，量子力学の場合には，時間推進の演算子 $U(t)=\exp(-itH/\hbar)$ のユニタリー性($U^{\dagger}(t)=U(t)^{-1}$)をこわさない近似法を作ることが大切である．よくやるような時間 t に関する摂動展開

$$U(t) = 1-\frac{it}{\hbar}H+\frac{1}{2}\left(-\frac{it}{\hbar}\right)^2 H^2+\cdots+\frac{1}{n!}\left(-\frac{it}{\hbar}\right)^n H^n+\cdots \tag{6.14}$$

を行ない，有限次(たとえば n 次)までで切る近似では，ユニタリー性は保証されない．また，Hamilton 系のような場合でも，e^{tA} や e^{tB} は $e^{t(A+B)}$ と同様の力学的な性質(symplectic な性質すなわち斜交変換で不変な性質)をもっているが，t で展開したのではこの性質は失われてしまい，近似が定性的に悪くなってしまう．確率過程の問題では，確率は保存しなければならない．しかし，次の **Trotter 公式**

$$e^{t(A+B)} = \lim_{n\to\infty}(e^{\frac{t}{n}A}e^{\frac{t}{n}B})^n \tag{6.15}$$

を用いると，n を有限に近似しても，上の対称性は保存される．さらに，第 5 章で述べたように，量子スピン系では，Trotter 公式を用いると温度の効果が，部分的ではあるが，高次までとりこまれて便利である．

以上(1)と(2)の 2 つの条件をみたすような近似法を一般的に議論するのが，この章の目的である．

まず，通常の Trotter 公式の近似の精度と収束の問題を議論する．n を十分大きいとすると

$$
\begin{aligned}
e^{x(A_1+A_2+\cdots+A_q)} &= \left\{e^{\frac{x}{n}(A_1+A_2+\cdots+A_q)}\right\}^n = \left\{e^{\frac{x}{n}A_1}e^{\frac{x}{n}A_2}\cdots e^{\frac{x}{n}A_q}+O\left(\frac{x^2}{n^2}\right)\right\}^n \\
&= \left\{e^{\frac{x}{n}A_1}e^{\frac{x}{n}A_2}\cdots e^{\frac{x}{n}A_q}\right\}^n+O\left(\frac{x^2}{n}\right)
\end{aligned}
\tag{6.16}
$$

であることが直観的に理解できる．上の第 2 行に移るときに，補正項が｛　｝の中で $O(1/n^2)$ であったものが，外では $O(1/n)$ となるのは，｛　｝が n 回の積になっており，補正も n 倍されるためである．この事実は，第 1 章から第 5 章までにひんぱんに利用されている．

さて，演算子 A のノルムを

$$
\begin{aligned}
&(1)\quad \|A\| \geqq 0,\ \|0\|=0,\ \|A\|=0 \text{ なら必ず } A=0 \\
&(2)\quad \|xA\| = |x|\|A\| \\
&(3)\quad \|A+B\| \leqq \|A\|+\|B\| \\
&(4)\quad \|AB\| \leqq \|A\|\cdot\|B\| \\
&(5)\quad \|1\| = 1
\end{aligned}
\tag{6.17}
$$

を満足するものとして定義する．たとえば，絶対値が最大となる固有値によって Hermite 行列 A のノルム $\|A\|$ を定義すると，上の 5 つの性質をすべて満足することがよく知られている．

いま，

$$
a = \exp\left\{\frac{x}{n}(A_1+A_2+\cdots+A_q)\right\}, \qquad b = e^{\frac{x}{n}A_1}e^{\frac{x}{n}A_2}\cdots e^{\frac{x}{n}A_q} \tag{6.18}
$$

とおくと，

$$
\begin{aligned}
\|a^n-b^n\| &\leqq \|a-b\|(\|a\|^{n-1}+\|a\|^{n-2}\cdot\|b\|+\cdots+\|b\|^{n-1}) \\
&\leqq n\|a-b\|\exp\left[\frac{(n-1)|x|}{n}(\|A_1\|+\|A_2\|+\cdots+\|A_q\|)\right]
\end{aligned}
\tag{6.19}
$$

および，(6.18) より

$$\|a-b\| \leqq 2\left[\exp\left\{\frac{|x|}{n}(\|A_1\|+\|A_2\|+\cdots+\|A_q\|)\right\}-\left\{1+\frac{|x|}{n}(\|A_1\|+\cdots+\|A_q\|)\right\}\right]$$

$$\leqq \frac{|x|^2}{n^2}(\|A_1\|+\cdots+\|A_q\|)^2\exp\left\{\frac{|x|}{n}(\|A_1\|+\cdots+\|A_q\|)\right\} \tag{6.20}$$

が成立する．したがって，これら2式を組み合わせると

$$\|\exp[x(A_1+A_2+\cdots+A_q)]-(e^{\frac{x}{n}A_1}e^{\frac{x}{n}A_2}\cdots e^{\frac{x}{n}A_q})^n\|$$

$$\leqq \frac{|x|^2}{n}\Bigl(\sum_{j=1}^{q}\|A_j\|\Bigr)^2\exp\Bigl(|x|\sum_{j=1}^{q}\|A_j\|\Bigr) \tag{6.21}$$

という不等式が導かれる．これより，次の一般化された Trotter 公式が導かれる(ノルム収束)．

$$e^{x(A_1+A_2+\cdots+A_q)} = \lim_{n\to\infty}(e^{\frac{x}{n}A_1}e^{\frac{x}{n}A_2}\cdots e^{\frac{x}{n}A_q})^n \tag{6.22}$$

上の分解は，$\{A_j\}$ が Hermite 演算子でも，Hermite にならない．そこで，次のような対称化された近似式

$$S(x) \equiv e^{\frac{x}{2}A_1}e^{\frac{x}{2}A_2}\cdots e^{\frac{x}{2}A_{q-1}}e^{xA_q}e^{\frac{x}{2}A_{q-1}}\cdots e^{\frac{x}{2}A_1} \tag{6.23}$$

を考えると，これは，x が実数のとき Hermite 演算子になり，$x=it/\hbar$ (純虚数)のときユニタリー演算子となり(実は，(6.22)の分解もユニタリーである)，もとの指数演算子((6.22)の左辺)の対称性を保持している．これは，物理的要請(1)をみたしているので好都合である．さらに具合のよいことに，この対称化された近似式 $S(x)$ は，(6.22)の近似式よりも1次だけ近似の精度がよくなっており，物理的要請(2)をもみたしている．すなわち

$$e^{x(A_1+\cdots+A_q)} = S(x)+O(x^3)$$

である．この理由を初等的に理解するには，(6.22)の左辺と(6.23)の右辺を両方とも x の2次まで展開して，いずれも，$\{A_j\}$ の非可換性を考慮に入れても

$$1+x(A_1+\cdots+A_q)+\frac{x^2}{2}(A_1+A_2+\cdots+A_q)^2$$

となることを確かめてみればよい．しかし，もっと巧妙な方法で次のように示すこともできる．この方法は，後で一般的議論をする際には必須の技巧である．さて，いま，$S(x)$ は x の1次まで正しいことは明らかであるから，

$$S(x)=e^{x(A_1+A_2+\cdots+A_q)+x^2R_2+x^3R_3+\cdots} \tag{6.24}$$

とおいてみる．ここに，$R_2, R_3, \cdots$ は，$S(x)$ がもとの指数演算子と x の何次まで正しいか，または x の何次からずれているか，その度合を表わす演算子であり，$\{A_j\}$ の交換子(すなわち，$[A_j, A_k], [[A_j, A_k], A_l], \cdots$ 等のように交換関係によって生成される演算子)からなる演算子である．たとえば，$R_2=0$ なら，$S(x)$ は少なくとも2次までは正しいことになる．ここで，$S(x)$ は(6.23)のように**対称化された演算子**であるから，

$$S(x)S(-x)=S(-x)S(x)=1 \tag{6.25}$$

という性質があることは明らかである．(もっと一般の対称化された演算子でも(6.25)式は成立する．逆に，これを対称化演算子の定義とすることもできる.) ところで，(6.24)式より

$$S(-x)=e^{-x(A_1+A_2+\cdots+A_q)+x^2R_2-x^3R_3+\cdots} \tag{6.26}$$

である．(6.25)の関係は $S(x)$ と $S(-x)$ が互いに可換であることを表わしており，(6.24)と(6.26)の積を作るとき肩の上で和をとることが許されて

$$S(x)S(-x)=e^{2(x^2R_2+x^4R_4+x^6R_6+\cdots)} \tag{6.27}$$

となる．ふたたび(6.25)の関係から，上式は，任意の x に対して恒等的に単位演算子にならなければならない．よって，

$$R_2=R_4=R_6=\cdots=R_{2n}=\cdots=0 \tag{6.28}$$

である．こうして，一般に，対称化された演算子の対数をとると，それは，x の奇関数演算子となることがわかる．要するに，対称化することにより，偶数次の演算子は互いに打ち消し合うのである．こうして，特に，対称化された演算子 $S(x)$ は，2次まで正しいことがわかった．

$S(x)$ が2次近似式であることを用いると，

$$e^{x(A_1+\cdots+A_q)}=\left\{S\left(\frac{x}{n}\right)\right\}^n+O\left(\frac{x^3}{n^2}\right) \tag{6.29}$$

となる．これは，次のようにして証明される．(6.16)と同様に

$$
\begin{aligned}
e^{x(A_1+\cdots+A_q)} &= \left\{e^{\frac{x}{n}(A_1+\cdots+A_q)}\right\}^n \\
&= \left\{S\left(\frac{x}{n}\right)+O\left(\frac{x^3}{n^3}\right)\right\}^n \\
&= \left\{S\left(\frac{x}{n}\right)\right\}^n+O\left(\frac{x^3}{n^3}\times n\right) \qquad (6.30)
\end{aligned}
$$

となる．ここで，$1/n$ の代わりに $1/n^2$ になったことに注意する．

そこで，もっと一般に，

$$
e^{x(A_1+\cdots+A_q)} = F_m(x)+O(x^{m+1}) \qquad (6.31)
$$

という**高次分解公式** $F_m(x)$ が見つかったとしよう．このとき，(6.30)と同様にして，

$$
e^{x(A_1+\cdots+A_q)} = \left\{F_m\left(\frac{x}{n}\right)\right\}^n+O\left(\frac{x^{m+1}}{n^m}\right) \qquad (6.32)
$$

という**一般化された Trotter 公式**が成立する．したがって，いかにして，物理的要請(1)としての対称性を保持しつつ高次分解 $F_m(x)$ を求めるかが，数値的経路積分を行なったり，Hamilton 力学系の問題を数値解析する際の重要な鍵となる．

一般に，ここで説明した分解公式(6.32)を用いて実際に数値計算を行なう場合には，第5章で解説した ST 変換後の等価な系の大きさ(格子の場合には，等価格子の数)に比例して計算量が増えることが多い．通常の Trotter 分解に比べて高次分解公式(6.32)を用いると，後でわかるように次数 m の指数関数(すなわち r^m)に比例して* 指数演算子の積の数が増え，等価な系の大きさが増えるが，誤差は，(6.32)からわかるように $(x/n)^m$ に比例して小さくなる．したがって，$r^m(x/n)^m \ll 1$ の条件をみたす領域では，高次分解公式を用いる方がはるかに有利となる．そこで，次節においてこのような指数演算子の高次分解を一般的に議論する．

---

* 最小の r は2であり，6-4節で述べるフラクタル分解では $r=5$ 程度である．

6-3 指数演算子高次分解の一般論

指数演算子の高次分解の一般的な公式として古くから知られているものに，次の **Zassenhaus 公式**がある．

$$e^{x(A+B)} = e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} e^{x^2 C_2/n^2} e^{x^3 C_3/n^3} \cdots \tag{6.33}$$

ただし，$C_2, C_3, \cdots$ は次のように与えられる．

$$C_2 = \frac{1}{2}[B, A], \quad C_3 = \frac{1}{3}[C_2, A+2B], \quad \cdots$$

しかし，この分解では，高次になるにつれて，多数の交換関係が現われて，あまり実用的ではない．それればかりではなく，物理的要請(1)としての対称性も保存されない近似である．もっとも，C_2 が A や B と可換な場合には，$C_3 = C_4 = \cdots = 0$ となり，(6.33)は，第1章の簡単な公式(1.30)に帰着し，役に立つこともある．

ここでは，もとの指数演算子の対称性を保存するような近似として，次のような高次分解を試みよう．すなわち，

$$e^{x(A+B)} = e^{t_1 xA} e^{t_2 xB} e^{t_3 xA} e^{t_4 xB} \cdots e^{t_M xA} + O(x^{m+1}) \tag{6.34}$$

となるようにパラメータ $\{t_j\}$ を決めることである．(6.34)式では M を奇数とした．M を偶数とすれば，最後は B で終わることになるが，$t_M = 0$ とすれば奇数の場合になるから，上のままの表現で一般性を失うことはない．$\exp\{x(A_1 + A_2 + \cdots + A_q)\}$ の場合に，(6.34)の表現をあらわに書こうとすると，$A_1, A_2, \cdots, A_q$ の順序がいろいろあり，極めて複雑となるからここでは省略するが，後に述べる一般論によれば，そのような複雑さからくる困難も克服できる．上の近似式(6.34)で，近似の次数 m をあげれば，それにつれて，積の数 M も大きくしなければならない．

この問題は，初等的に(6.34)の両辺を展開して A と B のあらゆる積の係数を等置して $\{t_j\}$ に関する方程式を導こうとすると，3次の分解でも極めて面倒

な計算になり，しかも，方程式の数が必要以上に(すなわち独立でないものが)多く出てくる．そこで，高次分解を一般的に構成するには，うまい工夫が必要になる．まして，$\exp\{x(A_1+A_2+\cdots+A_q)\}$ の場合はなおさらである．

さて，一般に，m 次近似式 $F_m(x)$ をそれより低次の近似式 $G_1(x), G_2(x), \cdots, G_r(x)$ の積として

$$F_m(x) = G_1(p_1x)G_2(p_2x)\cdots G_r(p_rx) \tag{6.35}$$

の形に表わすことにしよう．ただし，$\{G_j(x)\}$ はそれぞれ $\{s_j\}$ 次の近似式とする．ここで，s_j は1以上の整数とする．すなわち，$\{G_j(x)\}$ は少なくとも1次までは正しいものとする．この条件より直ちに，

$$p_1+p_2+\cdots+p_r = 1 \tag{6.36}$$

が得られる．すなわち，$H=A_1+A_2+\cdots+A_q$ として，$\exp(xH)$ を1次まで展開すると，(6.35)の左辺は

$$F_m(x) = 1+xH+\cdots \tag{6.37}$$

となり，(6.35)の右辺は，x の1次までの範囲で

$$(1+p_1xH)(1+p_2xH)\cdots(1+p_rxH) = 1+(p_1+p_2+\cdots+p_r)xH+\cdots \tag{6.38}$$

となる．(6.37)と(6.38)の x の1次の項を等置して(6.36)の条件が得られる．さらに高次を比較して $\{p_j\}$ を決めるのに十分な式を導こう．そのために，$G_j(x)$ を x で直接展開しないで，$G_j(x)$ の対数を x で展開してみる．

$$G_j(x) = \exp(xH+x^2R_{j2}+x^3R_{j3}+\cdots+x^nR_{jn}+\cdots) \tag{6.39}$$

ただし $\{R_{jn}\}$ は，$\{A_j\}$ の交換子の線形結合である．$G_j(x)$ の対数を x で展開した理由は，直接展開したときに現われる xH の無限次までの正しい項が，この対数の展開では1つの項 xH にまとめられるからである．(6.39)式の R_{jn} は，$G_j(x)$ が s_j の近似式であるという仮定から

$$R_{j2} = R_{j3} = \cdots = R_{js_j} = 0 \quad \text{かつ} \quad R_{j,s_j+1} \neq 0 \tag{6.40}$$

である．

ここで，一般の演算子 $G(x)$ に対して**チルダ(tilde)演算子** $\tilde{G}(x)$ を導入しておく．それは，$G(x)$ の各因子を逆の順にかけたもので定義する．すなわち，

$$\tilde{G}(x) = G^{-1}(-x) \tag{6.41}$$

の性質がある．たとえば，**1次近似式**

$$F_1(x) = e^{xA_1}e^{xA_2}\cdots e^{xA_{q-1}}e^{xA_q} \tag{6.42}$$

に対して $\tilde{F}_1(x)$ は

$$\tilde{F}_1(x) = e^{xA_q}e^{xA_{q-1}}\cdots e^{xA_2}e^{xA_1} \tag{6.43}$$

で与えられる．さて，$G(x)$ が**対称的**であることは

$$\tilde{G}(x) = G(x) \tag{6.44}$$

であることと等価である．(6.39)の $G_j(x)$ に対応する $\tilde{G}_j(x)$ を

$$\tilde{G}_j(x) = \exp(xH + x^2\hat{R}_{j2} + x^3\hat{R}_{j3} + \cdots + x^n\hat{R}_{jn} + \cdots) \tag{6.45}$$

と書くことにすると，(6.41)の性質から，

$$\hat{R}_{j,2n-1} = R_{j,2n-1} \quad \text{および} \quad \hat{R}_{j,2n} = -R_{j,2n} \tag{6.46}$$

となる．なぜなら，

$$\tilde{G}(x) = G^{-1}(-x) = \exp(xH - x^2R_{j2} + x^3R_{j3} - \cdots - (-x)^nR_{jn} + \cdots) \tag{6.47}$$

となるから，これと(6.45)を比較すれば，(6.46)が導かれる．この結果は後で有効に使われる．

さて，m 次近似式 $F_m(x)$ は，(6.35)と(6.39)から

$$\begin{aligned} F_m(x) &= \prod_{j=1}^{r} G_j(p_jx) = \prod_{j=1}^{r} e^{(xp_j)H + (xp_j)^2R_{j2} + (xp_j)^3R_{j3} + \cdots} \\ &= \mathrm{P}\exp\left[\sum_{j=1}^{r}\{(xp_jH) + (xp_j)^2R_{j2} + (xp_j)^3R_{j3} + \cdots\}\right] \end{aligned} \tag{6.48}$$

の形に書き表わすことができる．ただし，記号Pは，いわば**時間順序付け演算**を表わし，演算子の積において添字 j の小さい順に演算子を並べる操作を表わす．(6.48)の段階では，おなじ添字同士は非可換であるため指数演算子は分割することができず，操作Pは(6.48)の1行目に戻す働きをするだけである．そこで次に，おなじ添字 j の演算子同士を**対称化する操作***を記号Sで表わす

* R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. 17(1962)1100.

ことにする．これは，もっと具体的には，

$$\mathrm{S}(R_{jm}{}^{p}R_{jn}{}^{q}\cdots) = \frac{p!q!\cdots}{(p+q+\cdots)!}\sum \mathrm{Permu}\,(R_{jm}{}^{p}R_{jn}{}^{q}\cdots) \qquad (6.49)$$

で定義される．ただし $\sum$ Permu は，置換によって得られる演算子のすべての和をとることを意味する．この操作 S を用いると，(6.48)はさらに

$$F_m(x) = \mathrm{P}\exp(xY_1+x^2Y_2+x^3Y_3+\cdots) = \mathrm{PS}(e^{xY_1}e^{x^2Y_2}e^{x^3Y_3}\cdots)$$
$$= \sum_{n_1,n_2,n_3,\cdots}\frac{x^{n_1+2n_2+3n_3+\cdots}}{n_1!\,n_2!\,n_3!\cdots}\mathrm{PS}(Y_1{}^{n_1}Y_2{}^{n_2}Y_3{}^{n_3}\cdots) \qquad (6.50)$$

と表わされる．ただし，$n\geqq 2$ として

$$Y_1 = \sum_{j=1}^{r}(p_jH) \quad \text{および} \quad Y_n = \sum_{j=1}^{r}(p_j{}^nR_{jn}) \qquad (6.51)$$

である．(6.50)で操作 PS を行なうまでは，Y_1 の中の p_jH では，p_j と H を切り離してはならない．また，Y_n の中の $p_j{}^n$ と R_{jn} も切り離してはならない．R_{jn} が添字 j によらないときは，この注意は特に大切である．このときは，$p_j{}^n$ によって R_n の順序が決まるからである．すなわち，

$$\mathrm{P}\{(p_jH)(p_k{}^nR_n)\} = \begin{cases}(p_jH)(p_k{}^nR_n) = (p_jp_k{}^n)HR_n & (j<k)\\ (p_k{}^nR_n)(p_jH) = (p_jp_k{}^n)R_nH & (k<j)\end{cases} \qquad (6.52)$$

となる．ついでに，同じ添字 j に対しては，

$$\mathrm{S}\{(p_jH)(p_j{}^nR_n)\} = p_j{}^{n+1}\cdot\frac{1}{2}(HR_n+R_nH) \qquad (6.53)$$

となる．

さて，(6.50)は，さらに次のように変形できる．

$$F_m(x) = e^{xH}+\sum_{n_1,n_2,n_3,\cdots}{}'\frac{x^{n_1+2n_2+3n_3+\cdots}}{n_1!\,n_2!\,n_3!\cdots}\mathrm{PS}(Y_1{}^{n_1}Y_2{}^{n_2}Y_3{}^{n_3}\cdots) \quad (6.54)$$

ただし，記号 $\sum'$ は，$n_2=n_3=\cdots=0$ の場合を除く和を表わす．すなわち，$\{Y_1{}^{n_1}\}$ のみを含む項を無限次まで足し合わせたものが第 1 項の $\exp(xH)$ を表わし，第 2 項が残りの和を表わす．したがって，$F_m(x)$ が m 次近似となる必要十分条件は，$n_2=n_3=\cdots=0$ を除き，$n_1+2n_2+3n_3+\cdots+mn_m\leqq m$ をみた

すすべての正の整数 $n_1, n_2, n_3, \cdots, n_m$ に対して

$$\mathrm{PS}(Y_1^{n_1} Y_2^{n_2} Y_3^{n_3} \cdots) = 0 \tag{6.55}$$

となることである．これが**指数演算子高次分解の一般的処方**を与える．すなわち，(6.49)，(6.52)および(6.53)の手順によって，(6.55)を具体的に調べて $\{p_j\}$ に関する方程式を求める．少なくとも，次数 m があまり大きくないとき（たとえば $m \leqq 12$ に対して）は(6.55)をあらわに求め，$\{p_j\}$ に関する方程式に変換することは簡単に実行できる．これは R_{jn} の j 依存性があるかないかによってすこし異なるので，以下で具体的に(6.35)の $\{G_j(x)\}$ をどう選ぶかに応じてくわしく議論する．ここで述べた一般論の特徴は，$\exp\{x(A+B)\}$ のようにたった2つの演算子 A, B に対してだけでなく，$A_1, A_2, \cdots, A_q$ という任意の数の演算子に対して一般の条件式が求まることである．

（i） 非対称複素分解

(6.35)の一般的な分解公式で特に $\{G_j(x)\}$ として(6.42)の1次近似 $F_1(x)$ をとることにする．すなわち，

$$G_1(x) = G_2(x) = \cdots = G_r(x) = F_1(x) \tag{6.56}$$

とすると，任意の次数 m の近似式 $F_m(x)$ が

$$F_m(x) = F_1(p_1 x) F_1(p_2 x) \cdots F_1(p_r x) \tag{6.57}$$

の形に構成できる．

これは，もっとも簡単な高次分解の1つの一般的スキームである．(6.57)の積を作るベースが $F_1(x)$ という1次近似式を用いているからといって，ここで特殊な場合を扱っているわけではないことを強調しておきたい．(6.35)の形でこれ以降いろいろの場合を議論するが，要するに，高次分解には，多くの一般的なスキームが存在する．たとえば，対称な分解，非対称な分解，$\{p_j\}$ が複素数になる分解（これを**複素分解**とよぶ），$\{p_j\}$ がすべて実数になる分解（これを**実分解**とよぶ）等いろいろあり，これらの組合せによって，さらに多くの種類の高次分解のスキームが作れる．また，効率的に高次分解を作るには漸化方式が極めて便利である．どの方式にも長所，短所があるので，使用目的によって適当に選べばよい．場合によっては，以下に述べるいくつかのスキームを組

み合わせて，問題に応じて工夫する必要があろう．以下述べるように，一般的なスキームの作り方が一意的でなく，多くの自由度があることが，この問題の1つの特徴であり，この特徴を利用して最適のスキームを開発することが肝要である．

さて，(6.57)の分解に対応する一般論の表式中の Y_n は

$$Y_n = \sum_{j=1}^{r} (p_j{}^n R_n) \tag{6.58}$$

となる．すなわち，$G_j(x)$ が添字 j によらず $F_1(x)$ で表わされることに対応して，R_{jn} は j によらず一定の R_n で表わされる．このことにより，パラメータ $\{p_j\}$ を決める条件(6.55)が非常に簡単になる．たとえば，

$$\mathrm{PS}(Y_n) = \left(\sum_{j=1}^{r} p_j{}^n\right) R_n = 0 \ \rightarrow \ \sum_{j=1}^{r} p_j{}^n = 0 \qquad (n=2,3,\cdots,m) \tag{6.59}$$

この他にも，Y_n と Y_l との積などに関する条件式も表われるが，同様に簡単な表式に変換される．この分解の特徴は，(6.59)からわかるように，$\{p_j\}$ が複素数になることである．したがって，実分解を作るためには，後で述べるように別の分解を工夫しなければならない．

(ii) 漸化方式の高次分解

上に解説したように展開のベースとして1次近似式を用いて一般の高次分解を求めるよりも，いったん高次近似式，たとえば，$Q_{m-1}(x)$ が求まったら，それを展開のベースにして m 次近似式 $Q_m(x)$ を求める方が，$\{p_j\}$ に対する条件がはるかに簡単になる．実際，次の定理が成立する．

定理 1 指数演算子 $\exp[x(A_1+A_2+\cdots+A_q)]$ に対して，$m-1$ 次近似式(の1つ) $Q_{m-1}(\{A_j\},x)$ を考える．

$$\exp\left(x\sum_{j=1}^{q} A_j\right) = Q_{m-1}(x) + O(x^m) \tag{6.60}$$

ここで $Q_{m-1}(\{A_j\},x)$ を $Q_{m-1}(x)$ と略記した．このとき，m 次近似式(の1つ)を次のように作ることができる．すなわち，2以上の任意の整数 r に対して

$$Q_m(x) = Q_{m-1}(p_{m1}x)Q_{m-1}(p_{m2}x)\cdots Q_{m-1}(p_{mr}x) \qquad (6.61\text{a})$$

という積を作り，パラメータ $\{p_{mj}\}$ $(j=1,2,\cdots,r)$ を次の方程式

$$\sum_{j=1}^{r} p_{mj}{}^m = 0 \quad \text{かつ} \quad \sum_{j=1}^{r} p_{mj} = 1 \qquad (6.61\text{b})$$

の解として決める．▌

この定理は，(6.61a)の分解では，$Y_2 = Y_3 = \cdots = Y_{m-1} = 0$ から，一般論の条件(6.55)が $\mathrm{PS}(Y_m)=0$ というただ1つの条件(もちろん $p_{m1}+p_{m2}+\cdots+p_{mr}=1$ は必要)に帰着されること，および(6.59)の公式から導かれる．あるいは，一般論を使わず，直接初めから，$Q_{m-1}(x)$ を

$$Q_{m-1}(x) = \exp\{xH + x^m R_m(\{A_j\}) + \cdots\} \qquad (6.62)$$

と表わし，これを用いて，$Q_m(x)$ を指数演算子の肩の中で x^m 次まで求めると

$$Q_m(x) = \exp\left\{x\left(\sum_{j=1}^{r} p_j\right)H + x^m\left(\sum_{j=1}^{r} p_{mj}{}^m\right)R_m(\{A_j\}) + \cdots\right\} \qquad (6.63)$$

の形に書ける．なぜなら

$$\begin{aligned}&\exp\{(xp_j)H + (xp_j)^m R_m + \cdots\}\exp\{(xp_k)H + (xp_k)^m R_m + \cdots\}\\ &\quad = \exp\{x(p_j + p_k)H + x^m(p_j{}^m + p_k{}^m)R_m + \cdots\} \qquad (6.64)\end{aligned}$$

となるからである．ここで，$R_m = R_m(\{A_j\})$．また，「$+\cdots$」は $O(x^{m+1})$ の高次の項を表わす．(6.64)の左辺に x^{m+1} 次以上の高次の項がない場合でも，右辺には，H と R_m との非可換性のために，$O(x^{m+1})$ の項が現われる．(6.64)の公式を $j=1,2,\cdots,r$ までくり返し用いれば，(6.63)の表式が得られる．これが m 次近似式になる条件から，ふたたび条件式(6.61b)が導かれる．逆にいえば，PS記号を用いた一般表式(6.54)は，上のような簡単な場合だけでなく，以下のもっと複雑な例も統一的に扱えるようにした簡潔で抽象的な表現形式となっており，新しい組合せを工夫する際に極めて見通しがよく便利である．

そこで，以下では，$\{p_j\}$ に対する具体的な表式をあまり書かずに，一般的な枠組みを中心に解説する．実際に経路積分を行なう場合には，(6.52)と(6.53)のようなPSの操作を行なってパラメータ $\{p_j\}$ に対する連立方程式を数値的に解き，第1章から第5章までに説明した具体的な表示法を用いてあらわな経

路積分表式や経路和の表式(たとえば，第5章のST変換された表式)を求めなければならない.

さて，上の**漸化方式**の定理は概念的にも極めて重要である．すなわち，$\exp\left(x\sum_{k=1}^{q}A_k\right)$ を指数演算子の特徴を利用して，恒等的にいくつかの積に分割し，それぞれをより低次の分解公式で置きかえ，それぞれの項の正しい次数までの因子の積でもとの指数演算子を正しく表現できるように，(6.61)を利用してパラメータを決めるのである．この方式は，**高次分解消去法**(**decomposition-elimination method**)とよばれる一般的方法である．一般表式(6.54)と条件式(6.55)はその数学的表現に過ぎない.

以上の漸化式の方法はもっと一般に，$m-s$ 次近似式 $Q_{m-s}(x)$ $(s=1,2,\cdots)$ を展開のベースにして，m 次近似式 $Q_m(x)$ を求める**漸化式**に，次のように拡張できる.

$$Q_m(x) = Q_{m-s}(p_{m1}x)Q_{m-s}(p_{m2}x)\cdots Q_{m-s}(p_{mr}x) \tag{6.65}$$

ただし，パラメータ $\{p_{mj}\}$ は，$Y_2=Y_3=\cdots=Y_{m-s}=0$ から，Y_1 と $m+1-s\leqq n\leqq m$ の間の Y_n だけを含む条件式(6.55)から決まる.

(iii)　対称分解

(6.23)式の $S(x)$ のような対称化された分解，すなわち，**対称分解**は，一般に，(6.28)のような性質をもっており，$2m-1$ 次まで正しければ自動的に $2m$ 次まで正しいことがわかる．この性質があるために，対称高次分解は，実数のパラメータ $\{p_j\}$ の範囲でも作りやすく，実用的にもよく利用されている.

対称分解または対称近似式のもっとも簡単な作り方は，(6.41)のチルダ演算子 $\tilde{G}(x)$ を用いて $G(x)\tilde{G}(x)$ という積を作ることである．$\tilde{\tilde{G}}(x)=G(x)$ から

$$\widetilde{G(x)\tilde{G}(x)} = G(x)\tilde{G}(x) \tag{6.66}$$

となり，上の積 $G\tilde{G}$ は対称的である.

たとえば，2次の対称分解 $S(x)$ ((6.23)式)は1次近似式 $F_1(x)$ を用いて $S(x)=F_1(x/2)\tilde{F}_1(x/2)$ と書ける．この2次の対称近似式 $S(x)$ を展開のベースにして $2m-1$ 次近似 $S_{2m-1}(x)$ を，対称的パラメータ $p_{r+1-j}=p_j$ を用いて

$$S_{2m-1}(x) = S(p_1x)S(p_2x)\cdots S(p_rx) \tag{6.67}$$

と作ると，これは，一般的な性質(6.28)から，$2m$ 次まで正しい．すなわち，$S_{2m-1}(x)=S_{2m}(x)$ である．また，パラメータ $\{p_j\}$ は，一般表式(6.54)の Y_n の偶数次が $Y_2=Y_4=Y_6=\cdots=0$ となるため，残りの奇数次の $Y_1, Y_3, \cdots, Y_{2m-1}$ だけに関する条件式(6.55)から決まる．したがって，たとえば，典型的な条件式としては $\mathrm{PS}(Y_{2n-1})=0$ から

$$\sum_{j=1}^{r} p_j^{2n-1}=0 \qquad (n=2,3,\cdots,m) \tag{6.68}$$

が得られる．こうして，対称分解のパラメータは実数になり得る．$m=4$ とおけば 4 次の対称分解 $S_4(x)$ が求まる．しかも，(6.68)の条件からわかるように，3 次以上の実分解では，少なくとも 1 つの p_j は負でなければならない．すなわち，正のパラメータ $\{p_j\}$ だけを用いて 3 次以上の高次分解を構成することは不可能である．これは，具体例から経験的に知られていた事実であるが，一般論により定理として証明された．

(iv) 漸化的対称分解

一般論の(6.35)の $\{G_j(x)\}$ として，すなわち，展開のベースとして，2 次の対称近似式 $S(x)$ を用いて

$$S_{2m}(x)=S_{2m-2s}(p_{m1}x)S_{2m-2s}(p_{m2}x)\cdots S_{2m-2s}(p_{mr}x) \tag{6.69}$$

と展開する．ただし $p_{m,r+1-j}=p_{mj}$ である．$2m-2s$ 近似式に対しては，$Y_2=Y_3=\cdots=Y_{2m-2s}=0$ が成り立つから，Y_1 と $Y_{2m+1-2s}, \cdots, Y_{2m-1}$ に対する条件式(6.55)からパラメータ $\{p_j\}$ が決まる．

例えば，2 次ずつ高くなる漸化式($s=1$)に対する条件式は $p_{m1}{}^{2m-1}+p_{m2}{}^{2m-1}+\cdots+p_{mr}{}^{2m-1}=0$ となる．これと $p_{m1}+\cdots+p_{mr}=1$ とを組み合わせて $\{p_j\}$ を決めることができる．$r=3$ に対しては，$p_{m1}=p_{m3}=k_m$，$p_{m2}=1-2k_m$ とおくと，上の条件式は

$$(k_m)^{2m-1}+(1-2k_m)^{2m-1}+(k_m)^{2m-1}=0 \tag{6.70}$$

となる．したがって

$$k_m=\frac{1}{2-2^{1/(2m-1)}} \tag{6.71}$$

と求まる．しかし，$k_m>1$ のため，この $r=3$ の分解は $m\to\infty$ で収束しない．そこで次に簡単な場合として $r=5$ を考え，たとえば，$p_{m1}=p_{m2}=p_{m4}=p_{m5}=k_m$，$p_{m3}=1-4k_m$ とする．このときの条件式は $4k_m{}^{2m-1}+(1-4k_m)^{2m-1}=0$ となり，この解は

$$k_m = (4-4^{1/(2m-1)})^{-1} \qquad (m\geqq 2) \tag{6.72}$$

で与えられる．したがって，$m\geqq 2$ では，k_m は $1/3<k_m<1/2$ および $|1-4k_m|<2/3$ の範囲にある．後で述べるようにこの分解はフラクタルである．

さらに，4 次ずつ高くなる漸化式($s=2$)も同様にして作ることができる．このときのパラメータ $p_j\equiv p_{mj}$ は $\mathrm{PS}(Y_{2m-3})=\mathrm{PS}(Y_{2m-1})=\mathrm{PS}(Y_{2m-3}Y_1{}^2)=0$ から決まり，$p_1{}^{2m-3}+\cdots+p_r{}^{2m-3}=p_1{}^{2m-1}+\cdots+p_r{}^{2m-1}=0$ および

$$\sum_{j=1}^{r} p_j{}^{2m+2}+2\sum_{j=1}^{r} p_j{}^{2m+1}\Bigl(\sum_{k<j} p_k\Bigr)\Bigl(\sum_{l>j} p_l\Bigr) = 0 \tag{6.73}$$

(さらに $p_1+\cdots+p_r=1$)の条件式の解として与えられる．ただし，$p_{r+1-j}=p_j$ である．すべての m に対して実数解が存在する．$m=3$ とおけば，6 次の対称分解 $S_6(x)$ が求まる．このようにして求められる 4 次対称分解や 6 次対称分解は天体の軌道計算，化学反応および量子モンテカルロ法等に有効に使われている．

それでは，3 次等の奇数次の実分解は作れないのであろうか．少なくともいままでのスキームでは無理である．そこで次に，これまでと異なり，(6.35)の $G_j(x)$ が添字 j による場合を考えてみる．

(v) 非対称実分解

上に述べたように，非対称実分解を作るため，一般展開式(6.35)で特に 1 次近似式 $F_1(x)$ とそのチルダ演算子 $\tilde{F}_1(x)$ を交互にかけた表式

$$F_m(x) = F_1(p_1x)\tilde{F}_1(p_2x)F_1(p_3x)\tilde{F}_1(p_4x)\cdots F_1(p_{r-1}x)\tilde{F}_1(p_rx) \tag{6.74}$$

を考えてみよう．r が偶数なら上の式のように $\tilde{F}_1$ で終わるが，r が奇数なら F_1 で終わることに注意する．さて，この分解の新しい点は，一般表式の Y_n が(6.51)のように添字 j に依存する演算子 R_{jn} によって表わされることである．しかし，幸いなことに，$F_1(x)$ と $\tilde{F}_1(x)$ は(6.46)または(6.47)の関係で結ばれており，この場合，$R_{j,2n-1}=R_{2n-1}$，$R_{j,2n}=(-1)^{j-1}R_{2n}$ となり，j の偶・奇に

より符号が変わるだけであるから，一般表式(6.54)の Y_n は，この場合，

$$Y_{2n}=\sum_{j=1}^{r}(-1)^{j-1}p_j^{2n}R_{2n} \quad \text{および} \quad Y_{2n-1}=\sum_{j=1}^{r}p_j^{2n-1}R_{2n-1} \tag{6.75}$$

となる．すなわち，奇数次の Y_{2n-1} はこれまでと同形であるが，偶数次の Y_{2n} では，p_j^{2n} に符号がついて $(-1)^{j-1}p_j^{2n}$ となる．(i)の非対称複素分解の条件式(6.59)等は

$$\sum_{j=1}^{r}p_{2j-1}{}^{2n}-\sum_{j=1}^{r}p_{2j}{}^{2n}=0 \quad \text{および} \quad \sum_{j=1}^{r}p_j^{2n-1}=0 \tag{6.76}$$

と変化を受ける．実にうまいことに，符号がついたために，(6.76)は実数解をもちうるようになる．

上の議論は，(6.74)で 1 次近似式 $F_1(x)$ をベースにする代わりに，任意の次数の非対称近似式 $F_s(x)$ $(s=1,2,3,\cdots)$ を用いても同様である．こうして，**非対称実分解**の一般的スキームが見つかった．

ここで簡単な実例を示すことにしよう．まず，もっとも簡単な**2 次の非対称分解**を探してみよう．一般論にしたがって，(6.76)の第 1 式から，$p_1^2+p_3^2+\cdots=p_2^2+p_4^2+\cdots$ となる．そこで，$r=2$ とすると，$p_1=p_2=1/2$ となり，よく知られた対称分解 $S(x)=F_1(x/2)\tilde{F}_1(x/2)$ が得られる．$r=3$ とすると，$p_1+p_2+p_3=1$ および $p_1^2+p_3^2=p_2^2$ となり，無数の実数解がある．特に有理数解

$$p_1=\frac{m-n}{2m}, \qquad p_2=\frac{m^2+n^2}{2m(m+n)}, \qquad p_3=\frac{n}{m+n} \tag{6.77}$$

が無限個ある．ただし，m, n は $m(m+n)\neq 0$ をみたす任意の整数である．たとえば，$p_1=1/4$，$p_2=5/12$，$p_3=1/3$ はその例である．

次に，**3 次の非対称実分解**を求めてみよう．一般論にしたがって，パラメータ $\{p_j\}$ を決める式は，$\mathrm{PS}(Y_2)=\mathrm{PS}(Y_3)=\mathrm{PS}(Y_1Y_2)=0$ から

$$p_1^2+p_3^2+\cdots=p_2^2+p_4^2+\cdots, \qquad p_1^3+p_2^3+p_3^3+\cdots+p_r^3=0 \tag{6.78}$$

および

$$\sum_{k=1}^{r}p_k\hat{a}_{2k}=0, \qquad \hat{a}_{2k}=\sum_{j<k}(-1)^{j-1}p_j^2+\frac{1}{2}(-1)^{k-1}p_k^2 \tag{6.79}$$

となる．(6.79)式は条件 $PS(Y_1Y_2)=0$ から導かれる．その際，Y_1 が p_k に，Y_2 が $\hat{a}_{2k}$ に対応している．$\hat{a}_{2k}$ の第2項は，対称操作Sから出てくる．さらに $\hat{a}_{21}=(1/2)p_1{}^2$ である．

$r\leqq 4$ では実数解がないので，$r=5$ の場合について調べてみる．この場合には実用的にも役に立つ結果が得られる．この $r=5$ の場合の条件式(6.78)は，$p_1{}^2+p_3{}^2+p_5{}^2=p_2{}^2+p_4{}^2$ および $p_1{}^3+p_2{}^3+p_3{}^3+p_4{}^3+p_5{}^3=0$ となり，(6.79)は，$f(p_1,p_2,p_3)=f(p_5,p_4,p_3)$ という対称的な形に表わされる．ただし，関数 $f(x,y,z)$ は $f(x,y,z)=x^2(1-x)+y^2(2x+y-1)-z^2(x+y)$ で表わされる．これを**規格化の条件式** $p_1+p_2+p_3+p_4+p_5=1$ と合わせて解けばよい．**有理数解** $p_1=7/24$，$p_2=p_3=3/8$，$p_4=-25/24$，$p_5=1$ があることがわかる．実際，$7^2+24^2=25^2$，$7^3+9^3+9^3+24^3=25^3$ 等を用いて確かめることができる．(このようにパラメータの有理数解を求めることが，Fermat の大定理と関係する整数方程式論に帰着されることは興味深いことである．) 特に，$q=2$ の場合についてあらわに書いてみると

$$F_3{}^{(\mathrm{R})}(x)=e^{\frac{7}{24}xA}e^{\frac{2}{3}xB}e^{\frac{3}{4}xA}e^{-\frac{2}{3}xB}e^{-\frac{1}{24}xA}e^{xB} \tag{6.80}$$

となる．これはよく知られた**Ruth の分解公式**である．ここで求めた3次の非対称実分解(有理数パラメータ)は，Ruth の解の一般化(任意の個数の演算子 $A_1,A_2,\cdots,A_r$ に対する分解)になっている．しかも，ここの導出法は系統的な方法である．パラメータ $\{p_j\}$ の有理数解は，後で述べる数値解に比べて実用的にも便利である．

次に，パラメータ $\{p_j\}$ が対称となる(すなわち，$p_1=p_5$，$p_2=p_4$ となる)解を求めてみよう．これは，演算子としては，一般には非対称である．(演算子としても対称にするには，さらに $p_1=p_2$，$p_4=p_5$ の条件が必要となる．) この対称なパラメータの場合には，条件式 $f(p_1,p_2,p_3)=f(p_5,p_4,p_3)$ は自動的にみたされているので，残りの3つの式を解けばよい．すなわち，$p_1+p_2+\cdots+p_5=1$ 以外の2つの条件式は，$\{p_j\}$ の2次と3次の同次方程式になっているから，たとえば，$u=p_1/p_3$ とおくと，u に関する方程式 $12u^4-8u^3+6u^2-1=0$ が得

られ，同時に $v=p_2/p_3$ は $v^2=u^2+1/2$ の関係にあるので，u,v を解いて，$2(p_1+p_2)+p_3=1$ の条件を用いれば，次の 2 組の実数解が求まる．

［解A］ $p_1 = p_5 = 0.2683300957817599\cdots$

$p_2 = p_4 = 0.6513314272356399\cdots$

$p_3 = -0.8393230460347997\cdots$

［解B］ $p_1 = p_5 = 1.995$，$p_2 = p_4 = -3.69$，$p_3 = 4.39$

解 B は $|p_j|>1$ であり，実用的でない．これに対して，解 A は $|p_j|<1$ をみたしており(もっと正確には $|t_j|=|p_j+p_{j-1}|<1$ をみたしており)，実用的な非対称実分解である．いままでの 4 次，6 次の分解の多くは，条件 $|p_j|<1$ をみたしていないので，上の分解 A は実用的に重要な分解である．この 3 次の分解 $F_3(x)$ を用いて，4 次の分解 $F_4(x)$ を $F_4(x)=F_3(x/2)\tilde{F}_3(x/2)$ と作ることができる．これもすべて $|p_j|<1$ をみたしており便利な分解公式である．一般に，$2m-1$ 次の非対称実分解 $F_{2m-1}(x)$ が求まったときには，これから，$F_{2m}(x)=F_{2m-1}(x/2)\tilde{F}_{2m-1}(x/2)$ によって $2m$ 次の対称実分解を作ることができる．

以上の議論からもわかるとおり，ここの非対称分解のスキームは，じつは，(i)～(iv)までのすべてを含んだ統一的な方法になっている．実際，$p_2=p_4=\cdots=0$ とおけば(i)の場合になり，$p_1=p_2$，$p_3=p_4$，… とおけば(iii)の対称分解になっている．しかも p_j の偶数次に対する条件は $p_{2j-1}=p_{2j}$ の関係から自動的にみたされ，$2m-1$ 次の対称分解は $2m$ 次まで正しいということがふたたびこのようにしても理解される．

6-4 フラクタル経路積分法

以上の高次分解では概念的に興味深いことがいくつかある．1 つは，3 次以上の分解では，必ず負の p_j が存在することである．これは，量子力学，Hamilton 力学系や確率過程のように，x が時間を表わしている場合には，**負の時間**を含んだ経路積分になる．量子統計力学では，**負の温度**を含んだ経路積分となる．しかも，漸化方式で無限次までの高次分解をつくると，時間や温度の分割は，

Feynman の積分法のような等間隔ではなく，上で $\{p_j\}$ の求め方からわかるとおり，不等間隔となる．しかも，それは，フラクタル構造になっている．この**フラクタル性**をはっきりと理解するために，次のような具体的な分解を用いて議論しよう．一口にいって，フラクタルとは，もとの長さより細かく無限に分割する構造であるから，すべての j に対して $|p_j|<1$ となる分解を考えなければならない．対称実分解で $r=5$ の場合の解(6.72)はこの条件をみたしているので，これをもうすこしくわしく調べてみる．4 次分解 $S_4(x)$ は

$$S_4(x) = S^2(k_2x)S((1-4k_2)x)S^2(k_2x) \tag{6.81}$$

となる．ただし，(6.72)から $k_2=0.4144907717943757\cdots$ となる．また簡単のため，もとの指数演算子を $\exp\{x(A+B)\}$ とし，$S(x)=e^{\frac{x}{2}A}e^{xB}e^{\frac{x}{2}A}$ とする．このとき，$S_4(x)$ は

$$S_4(x) = e^{t_1xA}e^{t_2xB}e^{t_3xA}e^{t_4xB}\cdots e^{t_{10}xB}e^{t_{11}xA} \tag{6.82}$$

と書ける．ただし，$t_1=t_{11}=k_2/2$，$t_5=t_7=(1-3k_2)/2$，$t_6=1-4k_2$，他はすべて k_2 となることが，(6.81)式からわかる．$t_5=t_7<0$，$t_6<0$ であることが k_2 の値から示される．こうして，$S_4(x)$ に対する "時間" t_j の分割を横軸に，ステップ j を縦軸にとって図示すると，図 6-2(a)のようになる．

同様にして，6 次分解 $S_6(x)$ を作ると，

$$S_6(x) = S_4{}^2(k_3x)S_4((1-4k_3)x)S_4{}^2(k_3x) \tag{6.83}$$

となる．この表式に(6.82)の $S_4(x)$ を代入して整理すると

$$S_6(x) = e^{t_1xA}e^{t_2xB}e^{t_3xA}e^{t_4xB}\cdots e^{t_{50}xB}e^{t_{51}xA} \tag{6.84}$$

の形になる．ただし，ここの $\{t_j\}$ は，$t_1=t_{51}=\frac{1}{2}k_2k_3$，$t_5=t_7=t_{15}=t_{17}=t_{35}=t_{37}=t_{45}=t_{47}=\frac{1}{2}(1-3k_2)k_3$，$t_6=t_{16}=t_{36}=t_{46}=(1-4k_2)k_3$，$t_{21}=t_{31}=\frac{1}{2}k_2(1-3k_3)$，$t_{22}=t_{23}=t_{24}=t_{28}=t_{29}=t_{30}=k_2(1-4k_3)$，$t_{25}=t_{27}=\frac{1}{2}(1-3k_2)(1-4k_3)$，$t_{26}=(1-4k_2)(1-4k_3)$，他はすべて $t_j=k_2k_3$ となる．これを図示すると図 6-2(b)のようになる．同様に $S_8(x)$ についても調べてみると，図 6-2(c)のようになる．

さて，こうして，$m\to\infty$ まで仮りに実行したとすると，$k_m\to 1/3$ となるから，1 回ごとに 5 分割して長さのスケールが 1/3 になるので，Mandelbrot の

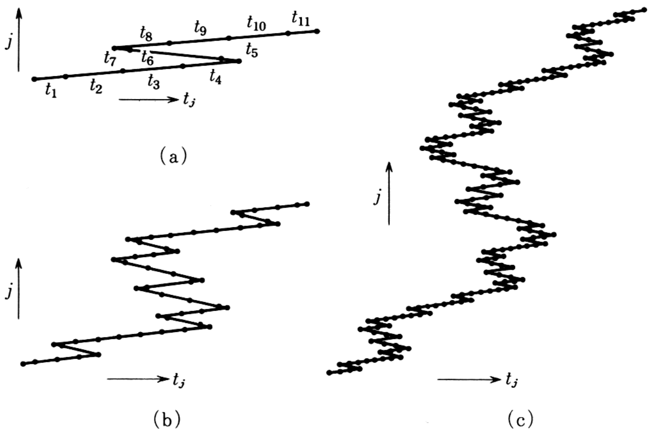


図 6-2 フラクタル経路積分法.（a）4 次分解 $S_4(x)$,（b）6 次分解 $S_6(x)$,（c）8 次分解 $S_8(x)$.（M. Suzuki : Phys. Lett. **A146**(1990)319 による.）

フラクタル次元 D を，この時間の分割に対して求めると

$$D = \frac{\ln(1/5)}{\ln(1/3)} = \frac{\ln 5}{\ln 3} = 1.46\cdots \tag{6.85}$$

となり，1 次元の時間を 1 次元と 2 次元の間のフラクタル次元構造に分割した経路積分となる．したがって，上のような指数演算子の漸化方式による無限次までの高次分解は，すべての j に対して $|p_j|<1$ ならば，フラクタル分解となる．このフラクタル分解は，演算子が有限行列のように有界のときにはノルム収束することが証明されている*.

* M. Suzuki: Commun. Math. Phys. **163** (1994) 491.

7 物性物理の諸問題

この章では，経路積分が本質的な役割を果たしている物性物理の 2,3 の問題をとりあげ，くわしい計算は省き，その概念的なさわりの部分だけを解説する．第 1 にとりあげる確率過程は，経路積分としては特に物理的でわかりやすい．しかも，これを用いて不安定系では，秩序生成という基本的な問題の解明の手掛りが得られる．次に，分子衝突という立場から化学反応を量子力学的に扱うときには経路積分法が極めて役に立つ．その際古典軌道法が有効である．また，秩序パラメータが量子場となる巨視的な量子系，たとえば，超伝導，超流動等では，量子ゆらぎによって，その秩序パラメータのトンネル効果が起こり，実際に観測され，興味ある現象がいろいろと発見されている．ここではマクロトンネル効果へのまさつの効果にふれる．

7-1 確率過程

a) Fokker-Planck 方程式の解の積分表示

自然現象を記述する際，すべての変数の時間変化を調べるのは不可能であるから，時間とともにゆっくり変化する変数に着目し，絶えず急激に変化している

部分には目をつぶって，すなわち，粗視化して扱うと便利である．

さて，着目する変数が体系の大きさ Ω に比例する場合，これを**巨視的な変数**とよび，X と書く．したがって $x=X/\Omega$ は1のオーダーの変数となる．体系が無限に大きく($\Omega\to\infty$)，無視した残りの変数の効果がまったく効かない場合には，体系は決定論的な運動をすることになり，x の時間変化は x の関数として与えられ，微分方程式で記述されるであろう．しかし，Ω が大きいといっても無限大ではなく有限の大きさの場合には，粗視化した変数の影響がゆらぎとして残る．このゆらぎの効果をとり入れた運動が**確率過程**である．

確率変数 x がポテンシャル $V(x)$ の中で拡散する現象は，時刻 t で系が x という値をとる**確率分布** $P(x,t)$ に対する **Fokker-Planck 方程式**(6.8)，すなわち，

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = LP(x,t), \qquad L \equiv -\frac{\partial}{\partial x}\alpha(x)+\varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{7.1}$$

で記述される．ただし，ここでは，拡散係数を ε で表わし，$\alpha(x)=dV(x)/dx$ である．(7.1)式は，次のような簡単な変換により Hermite 形式に移すことができて，第1章の一般論が適用できることになる．すなわち，(7.1)の平衡解

$$P_{\mathrm{eq}}(x) = \exp\left\{\frac{1}{\varepsilon}\int^x \alpha(x)dx\right\} \tag{7.2}$$

を用いて $H=P_{\mathrm{eq}}{}^{-1/2}LP_{\mathrm{eq}}{}^{1/2}$ の変換を行なうと，簡単な計算により，変換された Fokker-Planck 演算子は

$$H = \varepsilon\frac{d^2}{dx^2}-\tilde{V}(x) \tag{7.3}$$

の形になる．ただし，ポテンシャル $\tilde{V}(x)$ は

$$\tilde{V}(x) = \frac{1}{4\varepsilon}\alpha^2(x)+\frac{1}{2}\alpha'(x) \tag{7.4}$$

によって与えられる．また，もとの分布関数 $P(x,t)$ は

$$\frac{\partial}{\partial t}G(x,t) = HG(x,t) \tag{7.5}$$

の解 $G(x,t)$ を用いて

$$P(x,t) = \exp\left(\frac{1}{2\varepsilon}\int^x \alpha(x)dx\right)G(x,t) \tag{7.6}$$

によって表わされる.

さて，第1章の一般論によれば，初期条件 $G(x,0)=\delta(x-x_0)$ の下での解は，次の **Wiener-Feynman-Kac 公式**によって与えられる.

$$\begin{aligned} G(x,t) &= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} Dx(t)\left\langle \exp\left[-\int_0^t \tilde{V}(x(s))ds\right]\right\rangle \\ &\equiv \lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{t}{n}\sum_{k=1}^{n-1}\tilde{V}(x_k)\right]p(x-x_{n-1},t-t_{n-1}) \\ &\quad \times p(x_{n-1}-x_{n-2},t_{n-1}-t_{n-2})\cdots p(x_1,t_1)dx_1\cdots dx_{n-1} \end{aligned} \tag{7.7}$$

ただし $t_k-t_{k-1}=t/n$ $(k=1,2,\cdots,n\ ;\ t_0=0,t_n=t)$，および

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon t}}\exp\left(-\frac{x^2}{4\varepsilon t}\right) \tag{7.8}$$

である．すなわち，$p(x,t)$ は(7.8)の **Wiener 過程**の平均 $\langle\cdots\rangle$ を定義する確率測度を与える．この測度 $p(x,t)$ の表式を(7.7)に代入すると

$$\begin{aligned} G(x,t) &= \lim_{n\to\infty}\left(\frac{4\pi\varepsilon t}{n}\right)^{-n/2}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left[\frac{1}{4\varepsilon}\left(\frac{x_k-x_{k-1}}{t/n}\right)^2\right.\right. \\ &\quad \left.\left.+\tilde{V}(x_k)\right]\right\}dx_1\cdots dx_{n-1} \\ &= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} Dx(t)\exp\left\{-\int_0^t\left[\frac{1}{4\varepsilon}\left(\frac{dx}{ds}\right)^2+\tilde{V}(x(s))\right]ds\right\} \end{aligned} \tag{7.9}$$

とよく知られた表式が得られる．したがって，**確率分布関数** $P(x,t)$ は(7.4)と(7.6)を用いて

$$P(x,t) = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} Dx(t)\exp\left[-\int_0^t\left\{\frac{1}{4\varepsilon}\left(\frac{dx}{ds}-\alpha(x(s))\right)^2+\frac{1}{2}\alpha'(x(s))\right\}ds\right] \tag{7.10}$$

となる．これは，代数的には(6.9)のように解を $P(x,t)=\exp\{t(A+B)\}P(x,0)$ と表わし，Trotter 公式(6.15)を用いて，$\exp(tA/n)$ と $\exp(tB/n)$

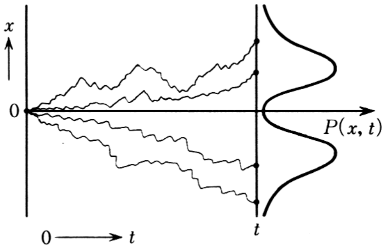


図 7-1 経路積分(7.10)の標本経路を $\alpha(x)=\gamma x-gx^3$（ただし $\gamma>0$, $g>0$）の場合に模式的に示したものである．$x_0=0$ から出発した経路が拡散して分布関数 $P(x,t)$ を構成する．

を交互にかけたことに対応している．すなわち，微小時間 $\Delta t=t/n$（n は十分大）の間では，ドリフトの効果と拡散の効果を分離してもよいことになり，この微小時間のドリフトの間は拡散しないものとして近似できる．この様子を模式的に示すと，図 7-1 のようになる．力学的軌道 $dx/dt=\alpha(x)$ のまわりに分布することが(7.10)の積分表示からわかる．ただし，$t=0$ で $x=0$ とすると，力学的軌道は恒等的に $x(t)\equiv 0$ となってしまうので，ゆらぎによる初期領域の分布(広がり)が秩序生成(図 7-1 における $P(x,t)$ の 2 重ピークの出現)にとって本質的に重要である．この様子は次項でもうすこしくわしく議論する．

b) 不安定系と WKB 近似

図 7-2 のような不安定点からの秩序生成の問題では，変数 x は秩序パラメータを表わす．すなわち，$x=0$ は無秩序状態を，$x\neq 0$ は秩序状態を表わす．(7.10)の経路積分は，$\varepsilon\to 0$（すなわち $\Omega\to\infty$）の極限で WKB 近似を用いると，第 2 章の一般表式(2.116)の 1 変数の結果の導出と同様に，漸近的に($\varepsilon\to 0$, $t\to\infty$, $\varepsilon\exp(2\gamma t)=$一定 で*)

$$P(x,t)\cong\frac{1}{\sqrt{2\pi\tau}}F'(x)\exp\left(-\frac{F^2(x)}{2\tau}\right) \tag{7.11}$$

となる．ただし，$F(x)=\exp\left(\int^x\gamma/\alpha(y)dy\right)$, $\tau=(\varepsilon/\gamma)\exp(2\gamma t)$ および $\gamma=$

---

* これを秩序形成におけるスケーリング極限とよぶ．くわしくは，本講座第 4 巻『統計力学』参照．

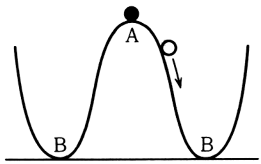


図 7-2　不安定点 A ($x_0=0$) からの緩和と秩序生成．A の近傍では，ゆらぎが重要であり，その他では非線形効果が重要となる．$\gamma\equiv\alpha'(0)$ は $x_0=0$ での成長速度を表わす．

$\alpha'(0)$ である．この解(7.11)を具体的な $\alpha(x)$ の表式に対して調べることによって，図 7-2 のような不安定系での秩序生成のメカニズムが理解できる．すなわち，図 7-2 に対応して，$\alpha(x)=\gamma x-gx^3$ ($\gamma>0$, $g>0$) とおくと，$x=0$ という無秩序状態がゆらぎ ε の効果によって，$t\to\infty$ で，$x=\pm(\gamma/g)^{1/2}$ という秩序状態に転移する様子がわかる．

c)　拡散現象とフラクタル経路積分法

前項で説明したとおり，拡散現象を記述する Fokker-Planck 方程式(7.1)の解は，代数的には，(6.9)式すなわち $P(x,t)=\exp\{t(A+B)\}P(x,0)$ で与えられる．通常の Trotter 分解または 2 次の対称分解までは，分割された時間 Δt はすべて正であるが，第 6 章で説明した 3 次以上の高次分解では必ず負の分割時間 t_j が現われる．

よく知られているように，拡散現象は不可逆過程であるから，負の時間に対しては，2 乗可積分空間では必ずしも $\exp(t_jB)$ ($t_j<0$) は存在しない．そこで，一見，指数演算子の高次分解は拡散現象には適用できないように思われるが，じつは，フラクタル分解(図 6-2)のように，途中で，$t=0$ の状態より過去に戻ることがない場合は，$t_j<0$ に対する指数演算 $\exp(t_jB)$ は必ず実行可能であることを強調しておきたい．この事実はあまりよく知られていないようであるから特に注意しておこう．

7-2　分子衝突と化学反応

化学反応を，量子力学を用いて微視的に研究することは，非常に重要な問題である．初期に A と BC という 2 つの原子または分子があって，反応後 AB と

C という 2 つの分子になる**化学反応**

$$\mathrm{A+BC \to AB+C} \tag{7.12}$$

を考えるとしよう．この反応を記述するハミルトニアンを H とすれば，この問題は行列要素

$$\langle \mathrm{AB,C}|\exp\left(-\frac{it}{\hbar}H\right)|\mathrm{A,BC}\rangle \tag{7.13}$$

を十分大きな時間 t に対して計算する問題に帰着される．ここで，$|\mathrm{A,BC}\rangle \equiv |\mathrm{i}\rangle$ は初期の A, BC の量子状態を表わす．$|\mathrm{AB,C}\rangle \equiv |\mathrm{f}\rangle$ は同様に終状態を表わす．したがって，これまで議論してきた指数演算子の高次分解の一般論が化学反応においても役立つことがわかる．行列要素を経路積分法を用いて具体的に求め，実際の化学反応を議論することは，専門書に譲ることにするが，ここで，量子統計力学の**密度行列** $\exp(-\beta H)$ と (7.13) における**時間推進演算子** $\exp(-itH/\hbar)$ との対応関係を注意しておきたい．すなわち，$t=-i\hbar\beta$ とおけば

$$\exp(-\beta H) = \exp\left(-\frac{itH}{\hbar}\right) \tag{7.14}$$

であるから，化学反応における古典的な極限($\hbar \to 0$)における近似法(トラジェクトリ法)は量子統計力学でも役立つことになる．しかし，量子統計力学では，あくまで，実数の行列要素を問題にするのに対して，化学反応では

$$\langle \mathrm{f}|\exp\left(-\frac{it}{\hbar}H\right)|\mathrm{i}\rangle = A(\mathrm{f,i})\exp\left(\frac{i\phi(\mathrm{f,i})}{\hbar}\right) \tag{7.15}$$

の形になり，**位相** $\phi(\mathrm{f,i})$ が重要になる．このため，指数演算子の高次分解は，量子統計力学よりも，量子化学等の**虚数温度**($\beta=it/\hbar$)の場合の方がはるかに有効である．これは，$\exp(-itH/\hbar)$ の高次分解でもそのユニタリー性と収束性が保証されているからである．

7-3 物性におけるトンネル効果

最近の技術の進歩により，巨視的またはメゾスコピックな系におけるトンネル効果が観測できるようになり，理論的な研究も盛んになりつつある．古くは，トランジスター，江崎のトンネルダイオード，超伝導接合，特に Josephson 効果等といろいろあるが，最近では，**まさつを伴うトンネル効果**も問題になっている．これらは秩序パラメータが量子ゆらぎによって巨視的に現われるので，**巨視的量子トンネル効果**(macroscopic quantum tunneling, 略して MQT)とよばれ，話題になっている．

理論的な立場からは，MQT も化学反応と本質的には同じであり，(7.15)の行列要素を求める問題になる．MQT で最近注目されている新しい点の1つは，**巨視的な自由度** q と**微視的な自由度** $\{x_\alpha\}$ との相互作用によって生ずるまさつの効果を考慮することである．実際に Caldeira と Leggett は，ハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2}M\dot{q}^2 + U(q) + \sum_\alpha \left\{\frac{1}{2}m_\alpha \dot{x}_\alpha{}^2 + \frac{1}{2}m_\alpha \omega_\alpha{}^2 x_\alpha{}^2\right\} + q\sum_\alpha c_\alpha x_\alpha \tag{7.16}$$

を考え，微視的な自由度 $\{x_\alpha\}$ と巨視的な自由度 q に関する経路積分

$$\begin{aligned} K &= \langle q_{\mathrm{f}}, \{x_\alpha\}_{\mathrm{f}} |\, \exp\left(-\frac{\tau}{\hbar}H\right) | q_{\mathrm{i}}, \{x_\alpha\}_{\mathrm{i}}\rangle \\ &= \int Dq \int \prod_\alpha Dx_\alpha \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau dsH[q(s), \{x_\alpha(s)\}]\right) \end{aligned} \tag{7.17}$$

を計算した．図 7-2 のようにポテンシャル $U(q)$ のトンネル距離を q_0 とし，まさつ力 $F=-\eta q$ によって定義されるまさつ係数を η とすると，トンネル確率 Γ は

$$\Gamma = \Gamma_0 \exp(-\mathrm{const}\cdot\eta q_0{}^2/\hbar) \tag{7.18}$$

と与えられる．ただし，Γ_0 は，図 7-3 のポテンシャルでのまさつのないときの Coleman のトンネル確率である．このように，まさつがあると，それによ

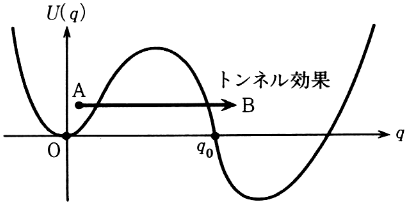


図 7-3 ポテンシャル $U(q)$ の中での極小領域 A から，もっと安定な最低領域 B へのトンネル効果.

って，トンネル確率は小さくなる．巨視的な変数 q としては，Josephson 接合の位相差等が考えられる．この結果は，また超伝導量子干渉素子(SQUID)の問題等にも応用できる．この SQUID は，最近脳の微弱な磁場を観測し，強い記憶や精神集中による思考の際に活性化される脳中心部の組織の特定に利用されつつある．

最後に，トンネル効果による量子核形成現象に関する実験結果を紹介する．液体 ^{4}He 中に安定に溶かし得る ^{3}He の濃度は，0.1 K 以下では約 6% 以下に限られる．それ以上に溶かそうとしても，^{3}He の相が析出し相分離してしまう．佐藤らは，この飽和濃度をわずかに上回る過飽和濃度の ^{3}He-^{4}He 混合液を超低温で用意し，相分離が起こり始める臨界濃度を温度の関数として実験的に測定した．その結果，10 mK 以下ではこの臨界濃度は温度によらず一定であることが分かった．

この相分離現象は，核形成によって起こる 1 次相転移である．核形成のメカニズムとしては，一般に

(a) 熱的ゆらぎ，

(b) 不純物の効果，

(c) 境界(容器壁面)の効果，

(d) トンネル効果による量子核形成

などが考えられる．しかし，これは理想的な ^{3}He-^{4}He 混合液での実験であるから，(b)は排除される．また，臨界濃度が温度によらないことから(a)も排除される．

さらに，もし容器の壁面に^{3}Heがたまるとすれば，それが種になって^{3}Heが析出して相分離が起こり得るが，^{4}Heの方が^{3}Heより質量が大きいため零点振動が小さく，^{4}Heが容器壁面に選択的に吸着され，壁面は自動的に^{4}Heで覆われてしまう．したがって(c)も排除される．こうして，佐藤らの観測した相分離現象は，(d)の量子核形成によるものと考えられる．

実際，彼らの実験は，理論的には10 K程度の(核形成に伴う)エネルギー障壁に対するトンネル効果と解釈されている．このトンネル効果によって形成された直後の核の大きさは10～20 A程度と見積もられている．したがって，これは，10^3～10^4個程度の原子が関与した(準)巨視的な量子核形成によって起こる相分離現象であると考えられる．

補章 最近の発展

[A] WKB近似が正確な答を与える場合

問題を整理するために，第2章のWKB近似の式(2.116)に戻ろう．$K[J]$ の項はもちろん，$\hbar$ の無限のべきを含んでいる*．（n ループまでの計算をすれば，$\hbar^{n-1}$ の係数までが決定されるのであった.） したがって，WKB近似が正確な解を与えるためには，まず，

①これらの展開はどこかで途切れなければならない，

次に，

②そこまでの値が，もともとの正しい値と一致する，

という2つの条件が満たされなければならない．このような場合があるだろうか．

すぐに思いつくのは調和振動子の系である．事実，われわれの行なった最初の計算(2.2)～(2.6)はWKB近似の手続きそのものであった．①は $\hbar$ の0次まででたしかに途切れており（Van Vleck 行列式は $\hbar$ の0次であった！），最

---

* これは収束する級数ではなく，漸近級数とよばれる．展開パラメータが特定の値（$\hbar\to 0$ など）に近づくときに限って，もとの関数値を正しく再現する．

後の答えはもちろん正確なものである．理由は明確で，もともと作用(2.3)は被積分量 q について 2 次であったから，Gauss 積分できた．これを古典解のまわりで展開しても 2 次までで，ふたたび Gauss 積分できるからである．

しかし最近，次のような経路積分公式

$$Z_J(T) \equiv \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{(2J+1)d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\right)\exp\left[2J\sum_{j=1}^{n}\left\{\ln\left(\frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}\right)\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{i\Delta th}{2}\frac{1-\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}\right\}\right]\Bigg|_{\text{periodic}} \tag{A.1}$$

が，$J\to\infty$(ちょうど，$2J\sim 1/\hbar$ のようにふるまう)で WKB 近似が正確な答えを与えるということがわかってきた．ここで，periodic は $\xi_0=\xi_N$ を表わし，h は何かあるパラメータである．($\hbar$ ではない．この章では $\hbar=1$ として議論する．) この一見非常に非線形な作用と積分測度から，どうして調和振動子と同じような現象が起こるのであろうか．これに答える前に，(A.1)の物理的意味を述べることから始めよう．

実は，(A.1)はスピンの経路積分表示(3.219)の別の表式である．これを示そう．基礎となるものは，**スピンコヒーレント状態**とよばれる

$$|\xi\rangle \equiv \frac{1}{(1+\xi^*\xi)^J}e^{\xi J_+}|J;-J\rangle, \qquad \langle\xi|\xi\rangle = 1 \tag{A.2}$$

である．ここで，$|J;-J\rangle$ は(3.198)の角運動量演算子 J_3 の最小固有状態 $m=-J$ である．単位の分解(3.202),(3.205)は，いまは

$$\boldsymbol{I}_J\left(=\sum_{m=-J}^{J}|J;m\rangle\langle J;m|\right) = \frac{2J+1}{\pi}\int\frac{d\xi d\xi^*}{(1+\xi^*\xi)^2}|\xi\rangle\langle\xi| \tag{A.3}$$

で(ここでは角運動量の大きさ J を意識して添字を付けた)，行列要素は

$$\begin{aligned}\langle\xi|J_3|\xi'\rangle &= -J\frac{1-\xi^*\xi'}{1+\xi^*\xi'}\langle\xi|\xi'\rangle \\ \langle\xi|J_+|\xi'\rangle &= J\frac{2\xi^*}{1+\xi^*\xi'}\langle\xi|\xi'\rangle\end{aligned} \tag{A.4}$$

と書ける．なお

$$d\xi d\xi^* \equiv d(\mathrm{Re}\,\xi)d(\mathrm{Im}\,\xi)$$
$$\langle\xi|\xi'\rangle = \frac{(1+\xi^*\xi')^{2J}}{(1+\xi^*\xi)^J(1+\xi'^*\xi')^J} \tag{A.5}$$

などである.

さて，次のハミルトニアン

$$H \equiv hJ_3 \tag{A.6}$$

で書かれる(3.1)式の量

$$Z_J(T) \equiv \mathrm{Tr}\, e^{-iTH} = \lim_{N\to\infty} \mathrm{Tr}(1-i\varDelta thJ_3)^N \tag{A.7}$$

は，(A.3)をくりかえし用いることで

$$\begin{aligned} Z_J(T) &= \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{(2J+1)d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\langle\xi_j|1-i\varDelta thJ_3|\xi_{j-1}\rangle\right)\Bigg|_{\xi_0=\xi_N} \\ &= \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{(2J+1)d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\left(\frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}\right)^{2J}\left(1+i\varDelta tJh\frac{1-\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}\right)\right)\Bigg|_{\xi_0=\xi_N} \end{aligned} \tag{A.8}$$

となる．最後の表式は(A.1)そのものである．(真中の項と最後の項を指数化してみればよい.) 群論では，$Z_J(T)$ を $SU(2)$ の表現 J の**指標**(character)という．その値は，(A.7)の最初の表式から

$$\begin{aligned} Z_J(T) &= \sum_{m=-J}^{J}\langle J;m|e^{-iThJ_3}|J;m\rangle \\ &= \sum_{m=-J}^{J} e^{-iThm} = \frac{\sin(J+1/2)hT}{\sin hT/2} \end{aligned} \tag{A.9}$$

となる．WKB 近似がこの答えを正確に与えることを確かめよう．

$J\to\infty$ としたとき，(A.1)の運動方程式は

$$\frac{\xi_j-\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j} = \frac{-i\varDelta th\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}, \qquad \frac{\xi_{j+1}^*-\xi_j^*}{1+\xi_j^*\xi_j} = \frac{i\varDelta th\xi_{j+1}^*}{1+\xi_{j+1}^*\xi_j} \tag{A.10}$$

となり，周期条件にあう解は，

$$\xi_j^{\mathrm{c}} = 0 \equiv \xi_{\mathrm{c}}^{(+)}, \qquad \xi_j^{\mathrm{c}} = \infty \equiv \xi_{\mathrm{c}}^{(-)} \tag{A.11}$$

の2つである．相当する古典作用は(A.1)の指数の肩を $e^{2JS[\xi]}$ と書くと，

$$S[\xi_c^{(+)}] = ihT, \qquad S[\xi_c^{(-)}] = -ihT \tag{A.12}$$

でどちらも有限であるので，双方の寄与を考えなければならない．ところが，$\xi \mapsto 1/\xi$ と変換すると，積分測度は不変で*，指数の肩の第1項も，周期条件を考慮することで不変であることがわかる．

$$\begin{aligned}\to \prod_{j=1}^{N}\left(\frac{1+1/\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+1/\xi_j^*\xi_j}\right)^{2J} &= \prod_{j=1}^{N}\left(\frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}\right)^{2J}\left(\frac{\xi_j}{\xi_{j-1}}\right)^{2J} \\ &= \prod_{j=1}^{N}\left(\frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}\right)^{2J}\end{aligned}$$

結局，最後の項だけが変化し，$h\to -h$ としたものになる．このことからいつも $\xi_c^{(+)}$ だけを考えておけばよく，$\xi_c^{(-)}$ の寄与は $h\to -h$ とすることで取り入れればよいことがわかる．

$2J+1\equiv\kappa$ とおいて $\xi_j\to\xi_j/\sqrt{\kappa}$ とスケールし，κ の0次までとると，(A.1)は

$$\begin{aligned}Z_J^{(+)}(T) &\cong e^{iJhT}\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{d\xi_j\xi_j^*}{\pi}\exp[-\xi_j^*\Delta\xi_j+i\Delta th\,\xi_j^*\xi_{j-1}]\right)\Bigg|_{\text{periodic}} \\ &= \frac{e^{iJhT}}{1-e^{-ihT}}\end{aligned} \tag{A.13}$$

となる．($Z_J^{(+)}(T)$ は $\xi_c^{(+)}$ のまわりの展開を示す．) (A.13)の経路積分の結果は，(2.45)と(2.68)で $\eta=0$，$\omega=h$，$T\to iT$ として得られた．$\xi_c^{(-)}$ の解は $h\to -h$ としたものであったから，全体で

$$Z_J^{(+)}(T)+Z_J^{(-)}(T) \cong \frac{e^{iJhT}}{1-e^{-ihT}}+\frac{e^{-iJhT}}{1-e^{ihT}} = \frac{\sin(J+1/2)hT}{\sin hT/2} \tag{A.14}$$

であり，これは(A.9)そのものである．したがってより高次のオーダーの寄与がないことを示せば目的は果たされるわけであるが，それは練習問題とし，以下では経路積分公式(A.1)の別の見方を与えることで，結果を納得することに

* こうした性質をもつ空間を**射影空間**とよび，いまは複素数 ξ についての射影空間だから，CP^1 (complex projective)という．

しよう．

2 種類の生成，消滅演算子 $a_\alpha^\dagger, a_\alpha$ $(\alpha=1,2)$

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, \qquad [a_\alpha, a_\beta] = 0 \tag{A.15}$$

を導入し，

$$T_i \equiv \boldsymbol{a}^\dagger \frac{\sigma_i}{2} \boldsymbol{a}, \qquad \boldsymbol{a} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{A.16}$$

ただし σ_i を Pauli 行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

とすると，T_i は J_i と同じ角運動量の交換関係(3.197)を満たす．$\boldsymbol{a}$ の表現は，$|0,0\rangle$ を真空として

$$|n_1, n_2\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!}}(a_1^\dagger)^{n_1}(a_2^\dagger)^{n_2}|0,0\rangle$$
$$a_\alpha|0,0\rangle = 0$$

で与えられるが，$0 \leqq n_\alpha < \infty$ であるので，明らかに角運動量の表現(3.198)よりも大きすぎる．そこで，全粒子数を一定にする

$$\boldsymbol{a}^\dagger \cdot \boldsymbol{a} \equiv \sum_{\alpha=1}^{2} a_\alpha^\dagger a_\alpha = 2J \tag{A.17}$$

という条件を置くと，$|m| \leqq J$ として

$$|J+m, J-m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J+m)!(J-m)!}}(a_1^\dagger)^{J+m}(a_2^\dagger)^{J-m}|0,0\rangle \tag{A.18}$$

は(3.198)の $|j;m\rangle$ と同じ振舞いをする．このことは(A.16)を作用させてみればわかる．そこで

$$|J;m\rangle \equiv |J+m, J-m\rangle \tag{A.19}$$

と書こう．角運動量の世界(3.197)～(3.200)は，こうして生成，消滅演算子(A.15)，(A.16)と条件(A.17)によって実現される*．

* J. Schwinger が考案したもので，a_α を Schwinger ボソンという．

条件(A.17)を課す演算子として

$$P_J \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\int_0^{2\pi}\frac{d\lambda}{2\pi}\exp[i\lambda(\boldsymbol{a}^\dagger\cdot\boldsymbol{a}-2J)-\epsilon\boldsymbol{a}^\dagger\cdot\boldsymbol{a}] \tag{A.20}$$

を考えよう.(ϵ は計算の最後で →0 とする.以下では記法の簡略化のために省略する.) 実際,a_α の空間全体のトレースが次のように

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\, e^{-iTH}P_J &\equiv \sum_{n_1,n_2=0}^{\infty}\langle n_1,n_2|e^{-iTH}\int_0^{2\pi}\frac{d\lambda}{2\pi}e^{i\lambda(n_1+n_2-2J)}|n_1,n_2\rangle \\ &= \sum_{m=0}^{2J}\langle m,2J-m|e^{-iTH}|m,2J-m\rangle \\ &\overset{m\to m-J}{=} \sum_{m=-J}^{J}\langle J;m|e^{-iTH}|J;m\rangle \equiv \mathrm{Tr}_J\, e^{-iTH} \end{aligned} \tag{A.21}$$

となり,スピン空間(の表現J)のトレースで表わされることから,P_Jが求める性質をもっていることがわかる.

(A.21)によれば,ハミルトニアンが(A.6)のとき,指標は,$\boldsymbol{a}$ のコヒーレント状態(1.83)を用いて

$$Z_J(T) = \int\frac{d^2zd^2z^*}{\pi^2}\langle z|e^{-iJH}P_J|z\rangle \tag{A.22}$$

と書けるはずである.ただし

$$|z\rangle = \exp[\boldsymbol{a}^\dagger\cdot z - z^\dagger\cdot\boldsymbol{a}]|0,0\rangle, \qquad \boldsymbol{a}^\dagger\cdot z \equiv \sum_{\alpha=1}^{2}a_\alpha^\dagger z^{(\alpha)} \tag{A.23}$$

で,単位の分解(1.89)は今や

$$\boldsymbol{I} = \int\frac{d^2zd^2z^*}{\pi^2}|z\rangle\langle z|, \qquad d^2z \equiv dz^{(1)}dz^{(2)} \tag{A.24}$$

で与えられている.次の関係式,

$$e^{\alpha\boldsymbol{a}^\dagger\cdot\boldsymbol{a}}\boldsymbol{a}e^{-\alpha\boldsymbol{a}^\dagger\cdot\boldsymbol{a}} = e^{-\alpha}\boldsymbol{a}, \qquad e^{\alpha\boldsymbol{a}^\dagger\cdot\boldsymbol{a}}\boldsymbol{a}^\dagger e^{-\alpha\boldsymbol{a}^\dagger\cdot\boldsymbol{a}} = e^{\alpha}\boldsymbol{a}^\dagger$$

に注意すると

$$P_J|z\rangle = \int_0^{2\pi}\frac{d\lambda}{2\pi}e^{-2iJ\lambda}|e^{i\lambda}z\rangle \tag{A.25}$$

であるから*，（A.22）は

$$Z_J(T) = \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-2iJ\lambda} \int \frac{d^2 z d^2 z^*}{\pi^2} \langle z | e^{-iTH} | e^{i\lambda} z \rangle \qquad (A.26)$$

となる．（1.92）のトレース公式と比べて，$e^{i\lambda}$ の入り方だけが異なっている．経路積分表示は，（1.93）よりただちに

$$Z_J(T) = \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-2iJ\lambda} \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \left(\int \frac{d^2 z_j d^2 z_j^*}{\pi^2} \exp\left[-z_j^\dagger \cdot \Delta z_j - \frac{ih\Delta t}{2} z_j^\dagger \sigma_3 z_{j-1} \right] \right) \Bigg|_{z_0 = e^{i\lambda} z_N} \qquad (A.27)$$

と求まる．ここでの境界条件

$$z_0 = e^{i\lambda} z_N \qquad (A.28)$$

を，**ひねった条件**(twisted boundary condition)という．

（A.27）はもちろん正しい答え（A.9）と一致する．これを見ておこう．（A.27）の指数の肩を

$$-\sum_{j=1}^{N} \left\{ z_j^\dagger \cdot \Delta z_j + \frac{ih\Delta t}{2} z_j^\dagger \sigma_3 z_{j-1} \right\} \equiv -\sum_{j,k}^{N} z_j^\dagger C_{jk} z_k \qquad (A.29)$$

$$C_{jk} \equiv \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & \cdots & -e^{i\lambda}\left(I - \frac{ih\Delta t}{2}\sigma_3\right) \\ -\left(I - \frac{ih\Delta t}{2}\sigma_3\right) & I & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\left(I - \frac{ih\Delta t}{2}\sigma_3\right) & I & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & I & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -\left(I - \frac{ih\Delta t}{2}\sigma_3\right) & I \end{bmatrix}$$

と書けば，Gauss 積分の公式

$$\prod_{a=1}^{M} \left(\int \frac{dz_a dz_a^*}{\pi} \right) \exp\left[-\sum_{a,b=1}^{M} z_a^* A_{ab} z_b \right] = \frac{1}{\det A_{ab}} \qquad (A.30)$$

を使うことにより，

* 実際は $z \mapsto e^{i\lambda-\epsilon} z$，$z^\dagger \mapsto e^{-i\lambda+\epsilon} z^\dagger$ である．

$$Z_J(T) = \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-2iJ\lambda} \lim_{N\to\infty} \left(\frac{1}{\det \boldsymbol{C}_{jk}}\right)$$

と(A.27)は求まる*．(A.29)から得られる

$$\det \boldsymbol{C}_{jk} = \det\left(\boldsymbol{I} - e^{i\lambda}\left(\boldsymbol{I} - \frac{ih\Delta t}{2}\sigma_3\right)^N\right)$$
$$= \left(1 - e^{i\lambda}\left(1 - \frac{ih\Delta t}{2}\right)^N\right)\left(1 - e^{i\lambda}\left(1 + \frac{ih\Delta t}{2}\right)^N\right)$$

をこれに代入して，

$$Z_J(T) = \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-2iJ\lambda} \frac{1}{(1-e^{i\lambda}e^{-ihT/2})(1-e^{i\lambda}e^{ihT/2})}$$

となる．分母の $e^{i\lambda}$ は実際は $e^{i\lambda-\epsilon}$ であったことを思い出しながら λ 積分を遂行すれば，たしかに(A.9)が得られる．

(A.27)を見ると，もはや結果は自明に見える．というのは，経路積分は調和振動子と同じ Gauss 積分で書けているからである．

事情をもうすこし詳しく見てみよう．変数変換

$$\boldsymbol{z} = \zeta\begin{pmatrix}\xi \\ 1\end{pmatrix}, \qquad \left|\frac{\partial(z^{(1)}, z^{(2)})}{\partial(\zeta, \xi)}\right| = \zeta \tag{A.31}$$

を(A.27)に施すと，

$$-\boldsymbol{z}_j^\dagger \cdot \Delta \boldsymbol{z}_j - \frac{ih\Delta t}{2}\boldsymbol{z}_j^\dagger \sigma_3 \boldsymbol{z}_{j-1} = -\zeta_j^*\zeta_j(1+\xi_j^*\xi_j) + \zeta_j^*\zeta_{j-1}(1+\xi_j^*\xi_{j-1})$$
$$+ \frac{ih\Delta t}{2}\zeta_j^*\zeta_{j-1}(1-\xi_j^*\xi_{j-1})$$

であることから，さらに $\zeta_j^* \to \zeta_j^*/(1+\xi_j^*\xi_j)$ (このとき，ζ_j は動かさない．こうしても双方積分変数としては独立であるから，矛盾は起きない)とスケールして

---

* 公式(A.30)の証明は，z_a と z_a^* は積分変数として独立とみなしてよいという事実に基づき，$z_a \to \sum_b A_{ab} z_b$，$z_a^* \to z_a^*$ と変数変換をすれば，あとは(1.88)(で $m=n=0$ と置いた式)より明らか．

$$
(\mathrm{A.27}) = \int_0^{2\pi}\frac{d\lambda}{2\pi}e^{-2iJ\lambda}\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\int\frac{d\zeta_j d\zeta_j^*}{\pi}\zeta_j^*\zeta_j \right.
$$
$$
\left.\times\exp\left[-\zeta_j^*\zeta_j+\Omega_j\zeta_j^*\zeta_{j-1}e^{i\lambda\delta_{j1}}\right]\right) \tag{A.32}
$$

を得る．ただし

$$
\Omega_j \equiv \frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}+\frac{ih\Delta t}{2}\frac{1-\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j} \tag{A.33}
$$

であり，ひねった境界条件はすでに考慮してしまっているので，$\xi_0=\xi_N$, $\zeta_0=\zeta_N$ である．λ 積分で残るのは，$e^{-2iJ\lambda}$ を消すように指数の肩から落としてきた項であるから，

$$
(\mathrm{A.32}) = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\right)\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{d\zeta_j d\zeta_j^*}{\pi}\zeta_j^*\zeta_j e^{-\zeta_j^*\zeta_j}\right)
$$
$$
\times\prod_{j=2}^{N}\exp[\Omega_j\zeta_j^*\zeta_{j-1}]\frac{1}{(2J)!}(\zeta_1^*\zeta_N)^{2J}\Omega_1^{2J}
$$

となる．次に，

$$
\zeta_j = r_j e^{i\theta_j}, \qquad \int\frac{d\zeta_j d\zeta_j^*}{\pi} = \int_0^{\infty}d(r_j^2)\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_j}{2\pi}
$$

とすると，いまの λ 積分のときと同様に，θ_1 積分で $e^{-2iJ\theta_1}$ を消すためには指数の肩から ζ_1 の項を $2J$ 個落としてこなければならない．順番にくりかえすと，角度部分の積分が完了して，($r_j^2\equiv x_j$ とおいて)

$$
Z_J(T) = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\right)\prod_{j=1}^{N}\left(\int_0^{\infty}dx_j\, x_j{}^{2J+1}e^{-x_j}\frac{\Omega_j^{2J}}{(2J)!}\right)
$$

が得られる．ガンマ関数

$$
\int_0^{\infty}dx\, x^m e^{-x} = \Gamma(m+1) = m!
$$

を思い出すと，結局

$$
Z_J(T) = \lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int\frac{(2J+1)d\xi_j d\xi_j^*}{\pi(1+\xi_j^*\xi_j)^2}\Omega_j^{2J}\right) \tag{A.34}
$$

となる．(A.33)より

$$\Omega_j^{2J} = \exp\left[2J\ln\left(\frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}+\frac{ih\Delta t}{2}\frac{1-\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}\right)\right]$$
$$\cong \exp\left[2J\left\{\ln\left(\frac{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_j}\right)+\frac{ih\Delta t}{2}\frac{1-\xi_j^*\xi_{j-1}}{1+\xi_j^*\xi_{j-1}}\right\}\right]+O(\Delta t^2)$$

であることに気付くと，(A.34)は(A.1)そのものであることがわかる．

つまり，非線形で複雑に見えた(A.1)の経路積分は，調和振動子(に拘束の付いた)系へ，変数変換を行なってその一部を積分したものであったわけである．こうして，WKB 近似が正確であるべき理由がわかった．

上述の議論は，Schwinger ボソン $a_\alpha, a_\alpha^\dagger$ $(\alpha=1,2)$ の場合であったが，その数を増し，$\alpha=1,2,\cdots,N+1$ にしても同様の議論ができる．これは，CP^N の経路積分表示を与え，その WKB 近似の正確さを物語っている．さらに，もっと一般化して，$a_{\alpha,a}, a_{\alpha,a}^\dagger$ $(1\leqq\alpha\leqq N$，$1\leqq a\leqq n$; $N\geqq 2n)$，などとすることから，Grassmann 多様体 $G_{N,n}\cong U(N)/U(n)\times U(N-n)$ 上の議論もできることがわかるが，紙面がつきた．巻末に挙げた論文を参照されたい．

[B] ハイブリッド指数積公式

第6章では，互いに非可換な演算子 A と B の和の指数演算子 $\exp[-x(A+B)]$ を，もとの A および B の指数演算子 e^{-xA}, e^{-xB} のみで展開する方法を説明した．ここでは，さらに，A と B の交換子，例えば $[A,B]$ または $[B,[A,B]]$ などを A と B に追加して展開する，ハイブリッド法を解説する．こうすることによって，分解パラメータの符号をすべて正にすることができ，非有界演算子にも応用できるようになるという利点が出てくる．

(i) Zassenhaus 公式

古くからよく知られている展開法は，次のように，すべての交換関係を用いる方法である．

$$e^{-x(A+B)} = e^{-xA}e^{-xB}e^{-\frac{1}{2}x^2[A,B]}e^{-\frac{1}{6}x^3[A+2B,[A,B]]}\cdots \qquad \text{(B.1)}$$

しかし，高次の交換関係 $[A,[A,B]],[B,[A,B]],\cdots$ などの指数演算子を計算するのは，もとの指数演算子 $\exp[-x(A+B)]$ と同様に，あるいはそれ以上に困難であり，この Zassenhaus 公式は実用的でない．

(ii)　ハイブリッドスキーム

さて，計算しやすい交換子のみを用いて展開する方法を考えよう．これが，**ハイブリッドスキーム**と呼ばれる方法である．どんなタイプの交換子が計算しやすいかは問題による．例えば，A がラプラシアン Δ で与えられ，B がポテンシャル $V(r)$ で与えられている問題，すなわち，

$$A = -\frac{1}{2}\Delta \quad \text{および} \quad B = V(r) \tag{B.2}$$

のときには，

$$[B,[A,B]] = |\nabla V(r)|^2 \geqq 0 \tag{B.3}$$

が成立するので，B と $[B,[A,B]]$ とはまとめて簡単に処理できる．したがって，この問題では，A,B の他に，$[B,[A,B]]$ を追加しても，計算の困難は生じない．

そこでまず，$A,B,[B,[A,B]]$ の3つの演算子を基底にして，4次分解公式を作ってみよう．構成の条件は，A,B が正値非有界作用素でも使えるような分解になるように分解パラメータを決めることである．第6章でもふれたとおり，

$$S(x) = e^{-\frac{x}{2}A}e^{-xB}e^{-\frac{x}{2}A} \tag{B.4}$$

は2次の対称分解となっている．これをすこし拡張して，パラメータ s を含む対称な指数積

$$Q(x,s) = e^{-sxB}e^{-\frac{x}{2}A}e^{-(1-2s)xB}e^{-\frac{x}{2}A}e^{-sxB} \tag{B.5}$$

を考えてみる．これも，任意のパラメータ s に対して x の2次まで，もとの指数積 $e^{-x(A+B)}$ と一致している．

それでは，3次の項はどうであろうか．$Q(x,s)$ と $e^{-x(A+B)}$ の差を計算して

みると，

$$Q(x,s)-e^{-x(A+B)}=\frac{x^3}{24}\{(6s-1)[A,[B,A]]+2(6s^2-6s+1)[B,[A,B]]\}+O(x^4) \quad (\mathrm{B.6})$$

となる．交換子 $[B,[A,B]]$ は残し，$[A,[B,A]]$ を消去する条件は，(B.6)式より，$s=1/6$ で与えられる．また，$[B,[A,B]]$ を消去する条件は $6s^2-6s+1=0$ で与えられる．$0<s<1/2$ をみたす解は $s=(3-\sqrt{3})/6$ となる．

したがって，$s=1/6$ に対して

$$P(x)=\exp\left(-\frac{x^3}{144}[B,[A,B]]\right) \quad (\mathrm{B.7})$$

とおき，指数積

$$S_4(x)=P(x)Q\left(x,\frac{1}{6}\right)P(x) \quad (\mathrm{B.8})$$

を考えると，これは対称な3次近似公式であるから，4次分解になっている．

同様にして，

$$P_\pm(x)=\exp\left(-\frac{2\pm\sqrt{3}}{48}x^3[A,[B,A]]\right) \quad (\mathrm{B.9})$$

を用いて

$$S_4^{(\pm)}(x)=P_\pm(x)Q\left(x,\frac{3\pm\sqrt{3}}{6}\right)P_\pm(x) \quad (\mathrm{B.10})$$

という指数積を作ると，これも4次分解になる．これらの分解公式は，もっとも簡単なハイブリッド分解である．しかも，期待どおり，$P(x)$ と $P_-(x)$ は定符号条件 $0<s<1/2$ をみたしている．

他にも多数のハイブリッド分解公式が構成できる．例えば，$C=\frac{1}{24}[A,B]$ とすると，

$$Q_4(x)=e^{-x^2C}e^{-\frac{x}{2}A}e^{-x^2C}e^{-xB}e^{x^2C}e^{-\frac{x}{2}A}e^{x^2C} \quad (\mathrm{B.11})$$

は4次近似式であることが，Baker-Campbell-Hausdorff 公式

$$e^A e^B = \exp\left(A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A-B,[A,B]]+\cdots\right) \qquad \text{(B.12)}$$

および

$$e^{\frac{A}{2}} e^B e^{\frac{A}{2}} = \exp(A+B-[A+2B,C]+\cdots) \qquad \text{(B.13)}$$

を用いて容易に示せる．実際，

$$e^{-x^2C} e^{-xB} e^{x^2C} = e^{-xB-x^3[B,C]+O(x^5)} \qquad \text{(B.14)}$$

に注意すると，

$$Q_2(x) = e^{-\frac{x}{2}A}(e^{-x^2C}e^{-xB}e^{x^2C})e^{-\frac{x}{2}A} = e^{-x(A+B)+x^3[A+B,C]+O(x^5)} \qquad \text{(B.15)}$$

となるから，$x^3[A+B,C]$ の項を打ち消すような因子を(B.15)の両側にかけて，次の 4 次分解公式が得られる．

$$Q_4(x) = e^{-x^2C} Q_2(x) e^{x^2C} = e^{-x(A+B)} + O(x^5) \qquad \text{(B.16)}$$

また，

$$S_a(x) = e^{-\frac{x}{2}A} e^{-xB} e^{-\frac{x}{2}A} \quad \text{および} \quad S_b(x) = e^{-\frac{x}{2}B} e^{-xA} e^{-\frac{x}{2}B} \qquad \text{(B.17)}$$

とおくと，

$$S_4^{(a)}(x) = Q(x) S_a\left(\frac{x}{3}\right) S_b\left(\frac{x}{3}\right) S_a\left(\frac{x}{3}\right) Q(x) \qquad \text{(B.18)}$$

および

$$S_4^{(b)} = S_a\left(\frac{x}{3}\right) Q(x) S_b\left(\frac{x}{3}\right) Q(x) S_a\left(\frac{x}{3}\right) \qquad \text{(B.19)}$$

は 4 次分解公式となる．ただし，$Q(x)$ は

$$Q(x) = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{6}\right)^3 [B,[A,B]]\right] \qquad \text{(B.20)}$$

である．

(iii) ハイブリッド分解公式の一般的な構成法

任意の個数(仮に q 個とする)の非可換な演算子 $\{A_j\}$ に対する分解公式を議

論する．問題に応じてあらかじめ選んだ自由 Lie 要素，つまり $\{xA_j\}$ およびその交換子の組を $C_1, C_2, \cdots, C_r$ とする．((ii)の(B.8)の例では，$C_1=xA$，$C_2=xB$，$C_3=x^3[B,[A,B]]$ である．) このとき，

$$e^{-x(A_1+\cdots+A_q)} = e^{t_1C_1}e^{t_2C_2}\cdots e^{t_rC_r}+O(x^{s+1}) \qquad \text{(B.21)}$$

とおいて，パラメータ $\{t_j\}$ を適当に決める．その方法を簡単に説明する．まず，次の逆問題を解かなければならない．すなわち，

$$e^{t_1C_1}e^{t_2C_2}\cdots e^{t_rC_r} = \exp[\Phi(\{t_jC_j\})] \qquad \text{(B.22)}$$

とおいて，$\Phi(\{t_jC_j\})$ を x^s まで求め，1次の項 $(t_1+\cdots+t_r)x(A_1+A_2+\cdots+A_q)$ 以外は s 次まですべて 0 と置くことにより，求める $\{t_j\}$ に対する条件が得られる．(B.22)の $\Phi(\{t_jC_j\})$ を具体的に計算するには，(ii)で用いた Baker-Campbell-Hausdorff 公式をくり返し利用するか，または，「量子解析」(本講座第4巻『統計力学』の補章)を用いるとよい．

交換子の種類を最小限どれだけ増せば，任意の s 次近似に対して，定符号のパラメータをもつ分解が構成できるかという問題は未解決である．

参考書・文献

経路積分に関して論じた教科書はそれほど多くない．経路についての和が量子力学での確率振幅を与えるという概念をもっと身につけたい向きには，

［1］ ファインマン，レイトン，サンズ著，砂川重信訳：量子力学，ファインマン物理学V（岩波書店，1979）

［2］ J.J.Sakurai 著，桜井明夫訳：現代の量子力学（上・下）（吉岡書店，1989）

を参照しつつ，

［3］ R.P.ファインマン，A.R.ヒッブス著，北原和夫訳：ファインマン経路積分と量子力学（マグロウヒル，1990）

を読まれることを薦める．これは，上記の考え方で経路積分に関して一貫して論じた好著であるが，書かれた年代（1965）が少し古いので，実務的な応用については

［4］ L.S.Schulman : *Techniques and Application of Path Integration*（Wiley-Interscience, 1981）（高塚和夫訳：ファインマン経路積分（講談社サイエンティフィク，1995））

が技術面での記述も詳しく，参考になるであろう．

本書と内容的に重なっているところもあるが，

［5］ 崎田文二，吉川圭二：径路積分による多自由度の量子力学（岩波書店，1986）

は，非摂動的な経路積分の取り扱いに詳しい．より個別のテーマ，例えば水素原子の経路積分での取扱いなどが詳しく書かれた，かなり大部の

［6］ H.Kleinert : *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, 2nd ed.（World Scientific, 1995）

は，分数統計や結び目理論などにも言及しており，専門家には面白い．これから，場の理論などで経路積分を“道具”として使おうという向きには，（つまり，あまり原理的な

問題に深入りしたくないという人には,）

［7］ A. Das : *Field Theory — A Path Integral Approach* (World Scientific, 1993)

が入りやすい.

以上が経路積分全般に関する文献である.

第1章に関するものとして，演算子順序の問題は

［8］ T. Kashiwa : Prog. Theor. Phys. **64**(1980)2164

［9］ T. Kashiwa, S. Sakoda and S. V. Zenkin : Prog. Theor. Phys. **92**(1994)669

を参考にしている．コヒーレント状態についての文献は,

［10］ J. R. Klauder, Bo-Sture Skagerstam : *Coherent States — Application in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, 1984)

がある．これは解説とともに論文選集となっており，基礎から応用まで幅広い解説書といえる.

第2章では，参考文献[4],[5],[6]とともに,

［11］ R. Rajaraman : *Solitons and Instantons ; An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory* (North-Holland, 1982)

に，本書では都合上扱えなかった，ソリトンのある場合のWKB法の詳しい解説を見ることができる.

第3章で扱った正準変換や拘束系の基本的な解説は,

［12］ 大貫義郎 : 解析力学，物理テキストシリーズ2（岩波書店，1987）

を見てほしい．変数変換の問題は

［13］ H. Fukutaka and T. Kashiwa : Ann. Phys. **185**(1988)301

をもとにしており，球面上の経路積分の議論は

［14］ H. Fukutaka and T. Kashiwa : Prog. Theor. Phys. **80**(1988)151 ; Ann. Phys. **176**(1987)301

を基礎にした．スピンの経路積分表示は,

［15］ T. Kashiwa : Int. J. Mod. Phys. **A5**(1990)375

を参考にした.

第4章での補助場の理論のもう少し詳しい解説は,

［16］ 九後汰一郎 : ゲージ場の量子論 II（培風館，1989）第6章

を見てほしい．また，格子上のFermi場の理論は，次の論文

［17］ T. Kashiwa and H. So : Prog. Theor. Phys. **73**(1985)762

［18］ K. Funakubo and T. Kashiwa : Int. J. Mod. Phys. **A8**(1993)4649

を参考にした.

第5章ではふれることのできなかった，他の量子モンテカルロ法に関しては,

［19］ M. H. Kalos : *Monte Carlo Methods in Quantum Problems*, NATO ASI Series (D. Reidel, 1984)

を参照していただきたい．第5章で解説した量子モンテカルロ法とその応用については，

［20］ M. Suzuki, ed.: *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Systems*(Springer-Verlag, 1987)

を参照するとよい．量子モンテカルロ法をスピン系に最初に応用した

［21］ M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda : Prog. Theor. Phys. **58**(1977)1377

には，アルゴリズムの実例と2次元スピン系の計算結果が具体的に示されている．Fermi系に関しては

［22］ H. J. Herrmann and F. Karsch, ed.: *Fermion Algorithms*(World Scientific, 1991)

がある．

第6章の内容は，大部分次の文献に基づいている．

［23］ M. Suzuki : Phys. Lett. **A146**(1990)319 ; J. Math. Phys. **32**(1991)400

日本語による解説としては，

［24］ 鈴木増雄：フラクタル経路積分法とその応用，数理科学，No. 328(1990)24

がある．これらの文献で初めて漸化方式が導入され，高次分解が無限次までつくられ，そのフラクタル性が指摘された．高次分解の一般論は

［25］ M. Suzuki : Phys. Lett. **A165**(1992)387 ; J. Phys. Soc. Jpn. **61**(1992)3015

に論じられている．特に前者の文献には，高次分解の積の最小数が自由Lie代数の次元数に関するWittの定理を利用しMoebius関数を用いて一般の m 次近似式に対して与えられている．後者の文献には，非対称高次分解の一般論が与えられ，高次分解の統一的取扱いが解説されている．

さらに，これらの高次分解の研究過程において，量子解析という一般的な非可換解析の体系化に気づいた．これは，非可換な演算子の関数 $f(A)$ の演算子 A に関する微分 $df(A)/dA$ などを導入して，一般的に定式化した数学である．詳しくは，『統計力学』(鈴木増雄著，現代物理学叢書，岩波書店，2000)の補章参照．

第7章に関しては，以下の文献が参考になろう．

［26］ N. G. van Kampen : *Stochastic Process in Physics and Chemistry*(North-Holland, 1981)

同書には確率過程の基礎，特にFokker-Planck方程式の導出から，不安定系での取扱い(スケーリング極限)まで解説されている．後者の議論は，

［27］ M. Suzuki : Prog. Theor. Phys. **56**(1976)77 ; Adv. Chem. Phys. **46**(1981) 195-278

に詳しい．化学反応に関しては，

［28］ W. H. Miller : Adv. Chem. Phys. **65**(1974)69-177

物性におけるトンネル効果に関しては，

［29］ A. O. Caldeira and A. J. Leggett : Phys. Rev. Lett. **46**(1981)211

[30]　A. J. Leggett et al.: Rev. Mod. Phys. **59**(1987)1-177

[31]　S. Coleman : Phys. Rev. **D15**(1977)2929, **D16**(1977)1962

[32]　P. Hanggi and P. Talkner : Rev. Mod. Phys. **62**(1990)251

[33]　U. Weiss : *Quantum Dissipative Systems*(World Scientific, 1993)

を参照されたい.

量子核形成の実験に関しては次の文献を参照するとよい.

[34]　T. Satoh, M. Morishita, M. Ogata and S. Katoh : Phys. Rev. Lett. **69**(1992) 335

[35]　T. Satoh, M. Morishita, S. Katoh, K. Hatakeyama and M. Takashima : Physica **B197**(1994)397

上記実験に関する理論的研究としては, 例えば

[36]　T. Nakamura and S. Takagi : Mod. Phys. Lett. **B9**(1995)591

また, 磁性体における磁化の量子トンネル効果に関しては, 次の解説がある.

[37]　P. C. E. Stamp, E. M. Chudnovsky and E. Barbara : Int. J. Mod. Phys. **B6** (1992)1356

補章に関しては以下の論文をあげておく. まず[**A**]項に述べた CP^1 については

[38]　K. Funahashi, T. Kashiwa, S. Sakoda and K. Fujii : J. Math. Phys. **36**(1995) 3232

を, CP^N については

[39]　K. Funahashi, T. Kashiwa, S. Sakoda and K. Fujii : J. Math. Phys. **36**(1995) 4590

を, Grassmann 多様体については

[40]　K. Fujii, T. Kashiwa and S. Sakoda : J. Math. Phys. **37**(1996)567

を参照されたい.

また, [**B**]項に述べたハイブリッド指数積公式については

[41]　M. Suzuki : Phys. Lett. **A201**(1995)425

を参照されたい.

さらに高次指数積公式の Aharonov-Bohm 効果への応用に関しては

[42]　H. De Raedt and K. Michielsen : Computers in Phys. **8**(1994)600 ; Ann. Physik **4**(1995)679

を参照されるとよい.

宇宙論における Einstein 方程式の数値的解法への応用に関しては

[43]　B. K. Berger and V. Moncrief : Phys. Rev. **D48**(1993)4676

を参照されたい.

第2次刊行に際して

本書が刊行されて4年になる．この間，経路積分法はさまざまな形で内容の深化が行なわれ，同時に，その適用範囲も次第に広げられて，量子物理学におけるもっとも有力な手法の1つとしての役割を担ってきた．それはこの方法が，従来の手段では十分に明らかにし得なかった微視的世界の物理的描像を時として簡明なかたちで提示しうること，またそこに新たな近似法開発の可能性を内包していること，などによるものといえる．このような経路積分の特質は，恐らく今後も多くの面で活かされていくにちがいない．

第2次の刊行にあたり，旧版の誤植を訂正するとともに，本書の従来の特徴を維持しつつも，以下に述べるような著者たちそれぞれによる最近の研究結果の若干を追加した．

まず第3章の終わりに，円環上でのDiracの量子化を特殊ケースとして含む(3.155)式が高次元球面上へどのように一般化されるかについて，簡単な補足を行なった．

また第7章の最後に，超低温(0.1 K以下)で ^{3}He-^{4}Heの混合液が相分離を開始する際の ^{3}Heの臨界濃度が，温度に依存しないという佐藤らの実験結果に関し，それがトンネル効果に基づく量子核形成の現象であることを紹介した．これは 10^3～10^4 個程度の原子が関与した(準)巨視的な量子核形成によって起

こる相分離現象であると考えられるものである．

最後の補章[A]には，WKB近似に関する補足的考察を追加した．よく知られているように，この近似法は経路積分によりその扱いが著しく簡易化される．とくに調和振動子の系では，第1近似だけで正確な答えが与えられるが，最近の研究で類似の事情が，スピンの量子力学などにも成り立つことがわかってきた．それをみるために，$SU(2)$ スピンの場合を第3章とはすこし異なる角度からとりあげ，いわゆるスピンコヒーレント状態を用いて，$\mathbf{CP}^1$ 上の経路積分表示を導いた．この例を通して上の事実の成立を具体的に確かめ，あわせてその理由を考察した．

また補章[B]として，最近の発展になる“ハイブリッド指数積公式”の解説を行なった．すでに第6章で互いに非可換な演算子 A と B の和の指数演算子 $\exp[-x(A+B)]$ をもとの指数演算子 e^{-xA}, e^{-xB} のみで展開する方法を説明したが，ここではさらに A と B から作られる交換子，例えば，$[A,B]$ または $[B,[A,B]]$ などを A と B に追加し，具体的な例を用いての議論が行なわれる．こうすることにより分解パラメータの符号をすべて正にすることができ，その結果，この扱いが非有界演算子にも応用できるという利点が示される．

なお，旧版の刊行後まもなく Oxford University Press で英訳の出版が企画され，目下そのための印刷の作業が進行中である（付記：1997年に *Path Integral Methods* という書名で刊行された）．

1996年7月

著　　者

索引

A, B

C

D

E

F

大貫義郎（おおぬき よしお）
1928年生まれ
1953年名古屋大学理学部物理学科卒業
現在 名古屋女子大学客員教授(文学部)，名古屋大学名誉教授

鈴木増雄（すずき ますお）
1937年生まれ
1961年東京大学理学部物理学科卒業
現在 東京理科大学教授(理学部応用物理学科)，東京大学名誉教授

柏 太郎（かしわ たろう）
1949年生まれ
1973年東北大学理学部物理学科卒業
現在 九州大学助教授(大学院理学研究院物理学部門)

経路積分の方法 ［現代物理学叢書］

2000年9月14日 第1刷発行

著 者 大貫義郎・鈴木増雄・柏 太郎

発行者 大塚信一

発行所 株式会社 岩波書店
〒101-8002 東京都千代田区一ツ橋2-5-5
電 話 案内 03-5210-4000
http://www.iwanami.co.jp/

印刷・法令印刷 カバー・半七印刷 製本・牧製本

ISBN4-00-006745-1 Printed in Japan

物理テキストシリーズ

全10巻　B6判並製

信頼のおける内容を，明快かつコンパクトに解説した
理工系学生のためのテキスト．

1	力学	小出昭一郎 著	218頁	1800円
2	解析力学	大貫義郎 著	240頁	1900円
3	熱力学	横田伊佐秋 著	202頁	1800円
4	電磁気学	砂川重信 著	324頁	1900円
5	電磁気学演習	砂川重信 著	302頁	2300円
6	量子力学入門	阿部龍蔵 著	212頁	1900円
7	振動と波動	寺沢徳雄 著	226頁	1800円
8	相対性理論	内山龍雄 著	240頁	1900円
9	流体力学	今井　功 著	266頁	1700円
10	統計力学	中村　伝 著	308頁	2400円